

CE

(19)日本国特許庁 (J P)

(12) 公 開 特 許 公 報 (A)

(11)特許出願公開番号
特開平11-100394
(43)公開日 平成11年(1999) 4月13日

(51)Int.Cl. ⁴	識別記号	F I
C 0 7 F 17/00		C 0 7 F 17/00
C 0 8 F 4/642		C 0 8 F 4/642
10/00		10/00

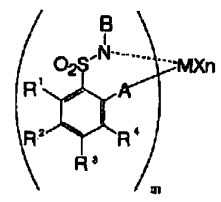
審査請求 未請求 請求項の数12 O L (全 65 頁)

(21)出願番号	特願平10-194047	(71)出願人	000005887 三井化学株式会社 東京都千代田区霞が関三丁目2番5号
(22)出願日	平成10年(1998) 7月9日	(72)発明者	松居 成和 山口県玖珂郡和木町和木六丁目1番2号 三井化学株式会社内
(31)優先権主張番号	特願平9-184912	(72)発明者	二田原 正利 山口県玖珂郡和木町和木六丁目1番2号 三井化学株式会社内
(32)優先日	平9(1997) 7月10日	(72)発明者	津留 和孝 山口県玖珂郡和木町和木六丁目1番2号 三井化学株式会社内
(33)優先権主張国	日本 (J P)	(74)代理人	弁理士 中嶋 重光 (外1名)
(31)優先権主張番号	特願平9-201111		
(32)優先日	平9(1997) 7月28日		
(33)優先権主張国	日本 (J P)		

最終頁に続く

(54)【発明の名称】 遷移金属化合物およびオレフィン重合用触媒ならびに重合方法

(57)【要約】
【課題】 オレフィン重合用触媒に有用な新規な遷移金属化合物、優れた重合活性を示すオレフィン重合用触媒、該触媒を用いたオレフィンの重合方法を提供する。
【解決手段】 オレフィン重合用触媒は、(A)下記一



... (I)

般式 (I) の遷移金属化合物と、(B)有機金属化合物、有機アルミニウムオキシ化合物、遷移金属化合物 (A) と反応してイオン対を形成する化合物から選ばれる少なくとも1種の化合物とからなる。

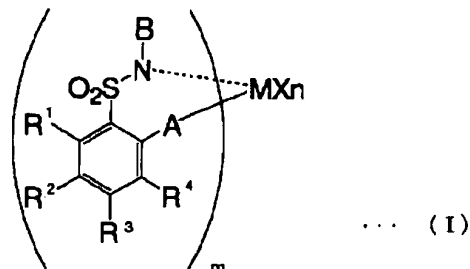
【化1】

- M: 周期律表第3~11族の遷移金属原子
- m: 1~6
- A: -O-, -S-, -Se-, -N(R⁵)-
- B: Nの結合基として-R¹⁰および-R¹¹、
=C(R¹²)R¹³、または=NR¹⁴
- R¹~R¹⁴: 水素、炭化水素基等
- n: Mの価数を満たす数
- X: ハロゲン、炭化水素基等

【特許請求の範囲】

【請求項1】 下記一般式(I)で表わされる遷移金属化合物；

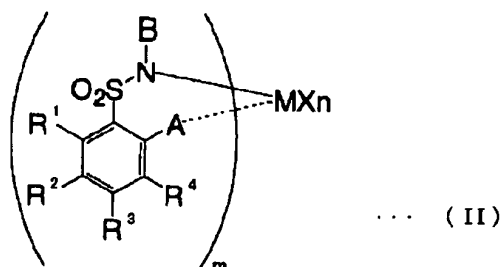
【化1】



(式中、Mは、周期律表第3～11族の遷移金属原子を示し、mは、1～6の整数を示し、Aは、酸素原子、イオウ原子、セレン原子、または、結合基として $-R^5$ を有する窒素原子を示し、Bは、Nの結合基として、 $-R^{10}$ および $-R^{11}$ 、 $=C(R^{12})R^{13}$ 、または $=NR^{14}$ を示し、 $R^1 \sim R^{14}$ は、互いに同一でも異なってもよく、水素原子、ハロゲン原子、炭化水素基、ヘテロ環式化合物残基、酸素含有基、窒素含有基、ホウ素含有基、イオウ含有基、リン含有基、ケイ素含有基、ゲルマニウム含有基、またはスズ含有基を示し、これらのうちの2個以上が互いに連結して環を形成していてもよく、また、mが2以上のときは、一つの配位子に含まれる $R^1 \sim R^{14}$ のうちの1個の基と、他の配位子に含まれる $R^1 \sim R^{14}$ のうちの1個の基とが結合されていてもよく、 R^1 同士、 R^2 同士、 R^3 同士、 R^4 同士、 R^5 同士、 R^{10} 同士、 R^{11} 同士、 R^{12} 同士、 R^{13} 同士、 R^{14} 同士は互いに同一でも異なってもよく、nは、Mの価数を満たす数であり、Xは、水素原子、ハロゲン原子、炭化水素基、酸素含有基、イオウ含有基、窒素含有基、ホウ素含有基、アルミニウム含有基、リン含有基、ハロゲン含有基、ヘテロ環式化合物残基、ケイ素含有基、ゲルマニウム含有基またはスズ含有基を示し、nが2以上の場合には、Xで示される複数の基は互いに同一でも異なってもよく、またXで示される複数の基は互いに結合して環を形成してもよい。)

【請求項2】 下記一般式(II)で表わされる遷移金属化合物；

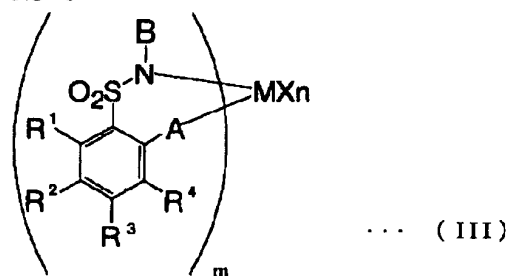
【化2】



(式中、Mは、周期律表第3～11族の遷移金属原子を示し、mは、1～6の整数を示し、Aは、結合基 $-R^5$ を有する酸素原子、イオウ原子、セレン原子、または、結合基として、 $-R^5$ および $-R^6$ 、 $=C(R^7)R^8$ 、または $=NR^9$ を有する窒素原子を示し、Bは、Nの結合基として $-R^{10}$ を示し、 $R^1 \sim R^{10}$ は、互いに同一でも異なってもよく、水素原子、ハロゲン原子、炭化水素基、ヘテロ環式化合物残基、酸素含有基、窒素含有基、ホウ素含有基、イオウ含有基、リン含有基、ケイ素含有基、ゲルマニウム含有基、またはスズ含有基を示し、これらのうちの2個以上が互いに連結して環を形成していてもよく、また、mが2以上のときは、一つの配位子に含まれる $R^1 \sim R^{10}$ のうちの1個の基と、他の配位子に含まれる $R^1 \sim R^{10}$ のうちの1個の基とが結合されていてもよく、 R^1 同士、 R^2 同士、 R^3 同士、 R^4 同士、 R^5 同士、 R^6 同士、 R^7 同士、 R^8 同士、 R^9 同士、 R^{10} 同士は互いに同一でも異なってもよく、nは、Mの価数を満たす数であり、Xは、水素原子、ハロゲン原子、炭化水素基、酸素含有基、イオウ含有基、窒素含有基、ホウ素含有基、アルミニウム含有基、リン含有基、ハロゲン含有基、ヘテロ環式化合物残基、ケイ素含有基、ゲルマニウム含有基またはスズ含有基を示し、nが2以上の場合には、Xで示される複数の基は互いに同一でも異なってもよく、またXで示される複数の基は互いに結合して環を形成してもよい。)

【請求項3】 下記一般式(III)で表わされる遷移金属化合物；

【化3】

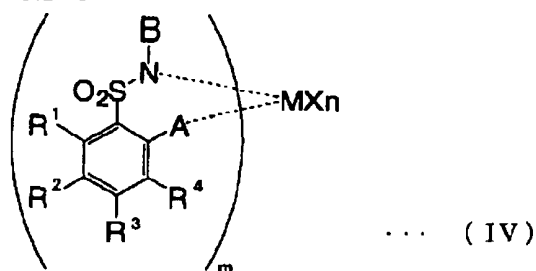


(式中、Mは、周期律表第3～11族の遷移金属原子を示し、mは、1～3の整数を示し、Aは、酸素原子、イオウ原子、セレン原子、または、結合基として $-R^5$ を有する窒素原子を示し、Bは、Nの結合基として $-R^{10}$ を示し、 $R^1 \sim R^{10}$ は、互いに同一でも異なってもよく、水素原子、ハロゲン原子、炭化水素基、ヘテロ環式化合物残基、酸素含有基、窒素含有基、ホウ素含有基、イオウ含有基、リン含有基、ケイ素含有基、ゲルマニウム含有基、またはスズ含有基を示し、これらのうちの2個以上が互いに連結して環を形成していてもよく、また、mが2以上のときは、一つの配位子に含まれる $R^1 \sim R^{10}$ のうちの1個の基と、他の配位子に含まれる $R^1 \sim R^{10}$ のうちの1個の基とが結合されていてもよく、R

¹同士、²同士、³同士、⁴同士、⁵同士、¹⁰同士は互いに同一でも異なってもよく、nは、Mの価数を満たす数であり、Xは、水素原子、ハロゲン原子、炭化水素基、酸素含有基、イオウ含有基、窒素含有基、ホウ素含有基、アルミニウム含有基、リン含有基、ハロゲン含有基、ヘテロ環式化合物残基、ケイ素含有基、ゲルマニウム含有基またはスズ含有基を示し、nが2以上の場合には、Xで示される複数の基は互いに同一でも異なってもよく、またXで示される複数の基は互いに結合して環を形成してもよい。）

【請求項4】 下記一般式(IV)で表わされる遷移金属化合物；

【化4】



(式中、Mは、周期律表第3～11族の遷移金属原子を示し、mは、1～3の整数を示し、Aは、結合基-R⁵を有する酸素原子、イオウ原子、セレン原子、または、結合基として、-R⁵および-R⁶、=C(R⁷)R⁸、または=NR⁹を有する窒素原子を示し、Bは、Nの結合基として、-R¹⁰および-R¹¹、=C(R¹²)R¹³、または=NR¹⁴を示し、R¹～R¹⁴は、互いに同一でも異なってもよく、水素原子、ハロゲン原子、炭化水素基、ヘテロ環式化合物残基、酸素含有基、窒素含有基、ホウ素含有基、イオウ含有基、リン含有基、ケイ素含有基、ゲルマニウム含有基、またはスズ含有基を示し、これらのうちの2個以上が互いに連結して環を形成していてもよく、また、mが2以上のときは、一つの配位子に含まれるR¹～R¹⁴のうちの1個の基と、他の配位子に含まれるR¹～R¹⁴のうちの1個の基とが結合されていてもよく、R¹同士、R²同士、R³同士、R⁴同士、R⁵同士、R⁶同士、R⁷同士、R⁸同士、R⁹同士、R¹⁰同士、R¹¹同士、R¹²同士、R¹³同士、R¹⁴同士は互いに同一でも異なってもよく、nは、Mの価数を満たす数であり、Xは、水素原子、ハロゲン原子、炭化水素基、酸素含有基、イオウ含有基、窒素含有基、ホウ素含有基、アルミニウム含有基、リン含有基、ハロゲン含有基、ヘテロ環式化合物残基、ケイ素含有基、ゲルマニウム含有基またはスズ含有基を示し、nが2以上の場合には、Xで示される複数の基は互いに同一でも異なってもよく、またXで示される複数の基は互いに結合して環を形成してもよい。)

【請求項5】 前記式(I)～(IV)において、Mが周

期律表第3～5族および8～10族から選ばれる遷移金属原子である請求項1ないし4のいずれか1項に記載の遷移金属化合物。

【請求項6】 (A) 請求項1ないし4に記載のいずれか1または複数の遷移金属化合物と、(B) (B-1) 有機金属化合物、(B-2) 有機アルミニウムオキシ化合物、および(B-3) 遷移金属化合物(A)と反応してイオン対を形成する化合物よりなる群から選ばれる少なくとも1種の化合物とからなることを特徴とするオレフィン重合用触媒。

【請求項7】 前記(A) 遷移金属化合物が、前記一般式(I)～(IV)において、Aを酸素原子とする化合物である請求項6に記載のオレフィン重合用触媒。

【請求項8】 前記(A) 遷移金属化合物が、前記一般式(I)～(IV)において、Aをイオウ原子とする化合物である請求項6に記載のオレフィン重合用触媒。

【請求項9】 前記(A) 遷移金属化合物が、前記一般式(I)～(IV)において、Aをセレン原子とする化合物である請求項6に記載のオレフィン重合用触媒。

【請求項10】 前記(A) 遷移金属化合物が、前記一般式(I)～(IV)において、Aを、結合基として-R⁵、-R⁵および-R⁶、=C(R⁷)R⁸、または=NR⁹を有する窒素原子とする化合物である請求項6に記載のオレフィン重合用触媒。

【請求項11】 前記遷移金属化合物(A)と、(B-1): 有機金属化合物、(B-2): 有機アルミニウムオキシ化合物、および(B-3): 遷移金属化合物(A)と反応してイオン対を形成する化合物よりなる群から選ばれる少なくとも1種の化合物(B)と、担体(C)とからなることを特徴とする請求項6ないし10のいずれか1項に記載のオレフィン重合用触媒。

【請求項12】 請求項6ないし11に記載のオレフィン重合用触媒の存在下にオレフィンを重合または共重合することを特徴とするオレフィンの重合方法。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【発明の属する技術分野】 本発明は新規な遷移金属化合物を提供し、該遷移金属化合物からなるオレフィン重合用触媒、ならびに該オレフィン重合用触媒を用いたオレフィンの重合方法に関する。

【0002】

【従来の技術】 オレフィン重合用触媒としては、いわゆるカミンスキー触媒がよく知られている。この触媒は非常に重合活性が高く、分子量分布が狭い重合体を得られるという特徴がある。このようなカミンスキー触媒に用いられる遷移金属化合物としては、たとえばビス(シクロペンタジエニル)ジルコニウムジクロリド(特開昭58-19309号公報参照)や、エチレンビス(4,5,6,7-テトラヒドロインデン)ジルコニウムジクロリド(特開昭61-130314号公報参照)などが知られ

ている。また重合に用いる遷移金属化合物が異なると、オレフィン重合活性や得られるポリオレフィンの性状が大きく異なることも知られている。さらに、最近新しいオレフィン重合用触媒としてジイミン構造の配位子を持った遷移金属化合物（国際公開特許第9623010号参照）が提案されている。

【0003】ところで、一般にポリオレフィン、機械的特性などに優れているため各種成形体用など種々の分野に用いられているが、近年ポリオレフィンに対する物性の要求が多様化しており、様々な性状のポリオレフィンが望まれている。また生産性の向上も課題である。このような状況のもと、オレフィン重合活性に優れ、しかも優れた性状を有するポリオレフィンを製造しうるオレフィン重合用触媒の出現が望まれている。

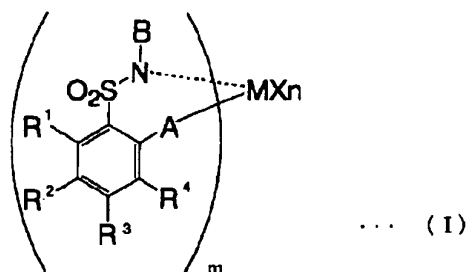
【0004】

【発明が解決しようとする課題】本発明は、新規な遷移金属化合物を提供し、該遷移金属化合物からなる優れたオレフィン重合活性を有するオレフィン重合用触媒、および該触媒を用いるオレフィンの重合方法を提供することを目的とする。

【0005】

【課題を解決するための手段】本発明に係る第1の遷移金属化合物は、下記一般式（I）で表わされる化合物である。

【化5】

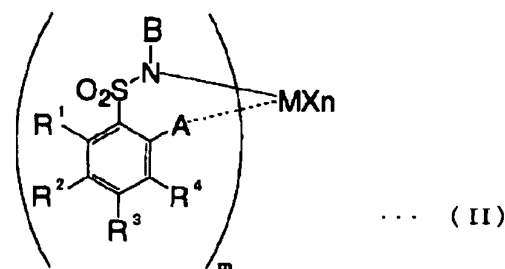


（式中、Mは、周期律表第3～11族の遷移金属原子を示し、mは、1～6の整数を示し、Aは、酸素原子、イオウ原子、セレン原子、または、結合基として $-R^5$ を有する窒素原子を示し、Bは、Nの結合基として $-R^{10}$ および $-R^{11}$ 、 $=C(R^{12})R^{13}$ 、または $=NR^{14}$ （ここで、 $-$ は単結合を、 $=$ は二重結合を表わす）を示し、 $R^1 \sim R^{14}$ は、互いに同一でも異なってもよく、水素原子、ハロゲン原子、炭化水素基、ヘテロ環式化合物残基、酸素含有基、窒素含有基、ホウ素含有基、イオウ含有基、リン含有基、ケイ素含有基、ゲルマニウム含有基、またはスズ含有基を示し、これらのうちの2個以上が互いに連結して環を形成していてもよく、また、mが2以上のときは、一つの配位子に含まれる $R^1 \sim R^{14}$ のうちの1個の基と、他の配位子に含まれる $R^1 \sim R^{14}$ のうちの1個の基とが結合されていていてもよく、 R^1 同士、 R^2 同士、 R^3 同士、 R^4 同士、 R^5 同士、 R^{10} 同士、

R^{11} 同士、 R^{12} 同士、 R^{13} 同士、 R^{14} 同士は互いに同一でも異なってもよく、nは、Mの価数を満たす数であり、Xは、水素原子、ハロゲン原子、炭化水素基、酸素含有基、イオウ含有基、窒素含有基、ホウ素含有基、アルミニウム含有基、リン含有基、ハロゲン含有基、ヘテロ環式化合物残基、ケイ素含有基、ゲルマニウム含有基またはスズ含有基を示し、nが2以上の場合には、Xで示される複数の基は互いに同一でも異なってもよく、またXで示される複数の基は互いに結合して環を形成してもよい。）

【0006】本発明に係る第2の遷移金属化合物は、下記一般式（II）で表わされる化合物である。

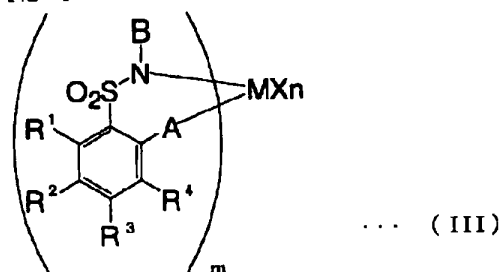
【化6】



（式中、Mは、周期律表第3～11族の遷移金属原子を示し、mは、1～6の整数を示し、Aは、結合基として $-R^5$ を有する酸素原子、イオウ原子、セレン原子、または、結合基として $-R^5$ および $-R^6$ 、 $=C(R^7)R^8$ 、または $=NR^9$ （ここで、 $-$ は単結合を、 $=$ は二重結合を表わす）を有する窒素原子を示し、Bは、Nの結合基として $-R^{10}$ を示し、 $R^1 \sim R^{10}$ は、互いに同一でも異なってもよく、水素原子、ハロゲン原子、炭化水素基、ヘテロ環式化合物残基、酸素含有基、窒素含有基、ホウ素含有基、イオウ含有基、リン含有基、ケイ素含有基、ゲルマニウム含有基、またはスズ含有基を示し、これらのうちの2個以上が互いに連結して環を形成していてもよく、また、mが2以上のときは、一つの配位子に含まれる $R^1 \sim R^{10}$ のうちの1個の基と、他の配位子に含まれる $R^1 \sim R^{10}$ のうちの1個の基とが結合されていていてもよく、 R^1 同士、 R^2 同士、 R^3 同士、 R^4 同士、 R^5 同士、 R^6 同士、 R^7 同士、 R^8 同士、 R^9 同士、 R^{10} 同士は互いに同一でも異なってもよく、nは、Mの価数を満たす数であり、Xは、水素原子、ハロゲン原子、炭化水素基、酸素含有基、イオウ含有基、窒素含有基、ホウ素含有基、アルミニウム含有基、リン含有基、ハロゲン含有基、ヘテロ環式化合物残基、ケイ素含有基、ゲルマニウム含有基またはスズ含有基を示し、nが2以上の場合には、Xで示される複数の基は互いに同一でも異なってもよく、またXで示される複数の基は互いに結合して環を形成してもよい。）

【0007】本発明に係る第3の遷移金属化合物は、下記一般式（III）で表わされる化合物である。

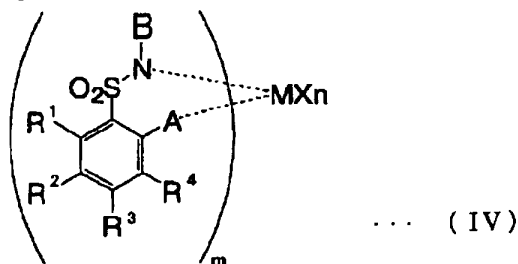
【化7】



(式中、Mは、周期律表第3～11族の遷移金属原子を示し、mは、1～3の整数を示し、Aは、酸素原子、イオウ原子、セレン原子、または、結合基として $-R^5$ を有する窒素原子を示し、Bは、Nの結合基として $-R^{10}$ を示し、 $R^1 \sim R^{10}$ は、互いに同一でも異なってもよく、水素原子、ハロゲン原子、炭化水素基、ヘテロ環式化合物残基、酸素含有基、窒素含有基、ホウ素含有基、イオウ含有基、リン含有基、ケイ素含有基、ゲルマニウム含有基、またはスズ含有基を示し、これらのうちの2個以上が互いに連結して環を形成していてもよく、また、mが2以上のときは、一つの配位子に含まれる $R^1 \sim R^{10}$ のうちの1個の基と、他の配位子に含まれる $R^1 \sim R^{10}$ のうちの1個の基とが結合されていてもよく、 R^1 同士、 R^2 同士、 R^3 同士、 R^4 同士、 R^5 同士、 R^{10} 同士は互いに同一でも異なってもよく、nは、Mの価数を満たす数であり、Xは、水素原子、ハロゲン原子、炭化水素基、酸素含有基、イオウ含有基、窒素含有基、ホウ素含有基、アルミニウム含有基、リン含有基、ハロゲン含有基、ヘテロ環式化合物残基、ケイ素含有基、ゲルマニウム含有基またはスズ含有基を示し、nが2以上の場合には、Xで示される複数の基は互いに同一でも異なってもよく、またXで示される複数の基は互いに結合して環を形成してもよい。)

【0008】本発明に係る第4の遷移金属化合物は、下記一般式(IV)で表わされる化合物である。

【化8】



(式中、Mは、周期律表第3～11族の遷移金属原子を示し、mは、1～3の整数を示し、Aは、結合基 $-R^5$ を有する酸素原子、イオウ原子、セレン原子、または、結合基として、 $-R^5$ および $-R^6$ 、 $=C(R^7)R^8$ 、または $=NR^9$ (ここで、 $-$ は単結合を、 $=$ は二重結合を表

わす)を有する窒素原子を示し、Bは、Nの結合基として、 $-R^{10}$ および $-R^{11}$ 、 $=C(R^{12})R^{13}$ 、または $=NR^{14}$ を示し、 $R^1 \sim R^{14}$ は、互いに同一でも異なってもよく、水素原子、ハロゲン原子、炭化水素基、ヘテロ環式化合物残基、酸素含有基、窒素含有基、ホウ素含有基、イオウ含有基、リン含有基、ケイ素含有基、ゲルマニウム含有基、またはスズ含有基を示し、これらのうちの2個以上が互いに連結して環を形成していてもよく、また、mが2以上のときは、一つの配位子に含まれる $R^1 \sim R^{14}$ のうちの1個の基と、他の配位子に含まれる $R^1 \sim R^{14}$ のうちの1個の基とが結合されていてもよく、 R^1 同士、 R^2 同士、 R^3 同士、 R^4 同士、 R^5 同士、 R^6 同士、 R^7 同士、 R^8 同士、 R^9 同士、 R^{10} 同士、 R^{11} 同士、 R^{12} 同士、 R^{13} 同士、 R^{14} 同士は互いに同一でも異なってもよく、nは、Mの価数を満たす数であり、Xは、水素原子、ハロゲン原子、炭化水素基、酸素含有基、イオウ含有基、窒素含有基、ホウ素含有基、アルミニウム含有基、リン含有基、ハロゲン含有基、ヘテロ環式化合物残基、ケイ素含有基、ゲルマニウム含有基またはスズ含有基を示し、nが2以上の場合には、Xで示される複数の基は互いに同一でも異なってもよく、またXで示される複数の基は互いに結合して環を形成してもよい。)

【0009】本発明の前記遷移金属化合物では、前記一般式(I)～(IV)において、Mが、好ましくは周期律表第3～5族および8～10族から選ばれる遷移金属原子である。

【0010】本発明に係るオレフィン重合用触媒は、(A-1)前記一般式(I)～(IV)のいずれか1または複数の遷移金属化合物と、(B)(B-1)有機金属化合物、(B-2)有機アルミニウムオキシ化合物、および(B-3)遷移金属化合物と反応してイオン対を形成する化合物よりなる群から選ばれる少なくとも1種の化合物とからなることを特徴としている。

【0011】本発明では、前記(A)遷移金属化合物が、前記一般式(I)～(IV)において、Aを酸素原子とする化合物であることが好ましい。

【0012】また本発明では、前記(A)遷移金属化合物が、前記一般式(I)～(IV)において、Aをイオウ原子とする化合物であることが好ましい。

【0013】また本発明では、前記(A)遷移金属化合物が、前記一般式(I)～(IV)において、Aをセレン原子とする化合物であることが好ましい。

【0014】また本発明では、前記(A)遷移金属化合物が、前記一般式(I)～(IV)において、Aを、結合基として $-R^5$ 、 $-R^5$ および $-R^6$ 、 $=C(R^7)R^8$ 、または $=NR^9$ を有する窒素原子とする化合物であることが好ましい。

【0015】本発明に係るオレフィン重合用触媒は、前記遷移金属化合物(A)と、(B-1):有機金属化合物、(B

-2):有機アルミニウムオキシ化合物、および(B-3):遷移金属化合物(A)と反応してイオン対を形成する化合物よりなる群から選ばれる少なくとも1種の化合物(B)に加えて、担体(C)を含んでいてもよい。

【0016】本発明に係るオレフィンの重合方法は、前記のような触媒の存在下に、オレフィンを重合または共重合させることを特徴としている。

【0017】

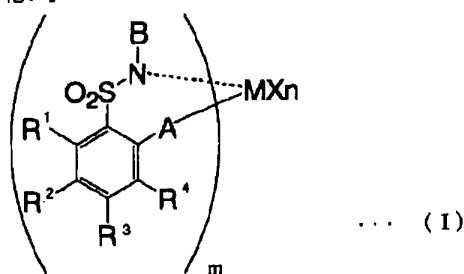
【発明の実施の形態】以下、本発明の遷移金属化合物、およびこの遷移金属化合物からなるオレフィン重合用触媒ならびにこの触媒を用いたオレフィンの重合方法について具体的に説明する。なお、本明細書において「重合」という語は、単独重合だけでなく、共重合をも包含した意味で用いられることがあり、「重合体」という語は、単独重合体だけでなく、共重合体をも包含した意味で用いられることがある。

【0018】本発明に係る遷移金属化合物は、前記一般式(I)~(IV)で表わされる。また、本発明に係るオレフィン重合用触媒は、(A)前記一般式(I)~(IV)で表される化合物のいずれか1または複数の遷移金属化合物と、(B)(B-1)有機金属化合物、(B-2)有機アルミニウムオキシ化合物、および(B-3)遷移金属化合物と反応してイオン対を形成する化合物よりなる群から選ばれる少なくとも1種の化合物とから形成されている。まず、本発明の遷移金属化合物(A)とともに、それからなるオレフィン重合用触媒を形成する各触媒成分について説明する。

【0019】(A)遷移金属化合物

本発明で用いられる第1の遷移金属化合物は、下記一般式(I)で表される化合物である。

【化9】



(なお、ここでN……Mは配位していることを示すが、この化合物においてはN……Mが配位していないものも含む。)

【0020】式(I)中、Mは周期律表第3~11族の遷移金属原子(3族にはランタノイドも含まれる)を示し、好ましくは3~10族(3族にはランタノイドも含まれる)の金属原子であり、より好ましくは3~5族および8~10族の金属原子であり、特に好ましくは4族または5族の金属原子である。具体的には、スカンジウム、イットリウム、ランタノイド、チタン、ジルコニウ

ム、ハフニウム、バナジウム、ニオブ、タンタル、クロム、モリブデン、タングステン、マンガン、レニウム、鉄、ルテニウム、コバルト、ロジウム、ニッケル、パラジウムなどであり、好ましくはスカンジウム、ランタノイド、チタン、ジルコニウム、ハフニウム、バナジウム、ニオブ、タンタル、鉄、コバルト、ロジウム、ニッケル、パラジウムなどであり、より好ましくは、チタン、ジルコニウム、ハフニウム、バナジウム、ニオブ、タンタル、鉄、コバルト、ロジウムなどであり、特に好ましくはチタン、ジルコニウム、ハフニウムである。

【0021】mは、1~6、好ましくは1~4、さらに好ましくは1~2の整数を示す。Aは酸素原子、イオウ原子、セレン原子、または、結合基として-R⁵を有する窒素原子を示し、Bは、Nの結合基として、-R¹⁰および-R¹¹、=C(R¹²)R¹³、または=NR¹⁴(ここで、-は単結合を、=は二重結合を表わす)を示し、R¹~R¹⁴は、互いに同一でも異なってもよく、水素原子、ハロゲン原子、炭化水素基、ヘテロ環式化合物残基、酸素含有基、窒素含有基、ホウ素含有基、イオウ含有基、リン含有基、ケイ素含有基、ゲルマニウム含有基、またはスズ含有基を示し、これらのうちの2個以上が互いに連結して環を形成していてもよい。

【0022】ここでR¹~R¹⁴は、水素原子、ハロゲン原子、炭化水素基、ヘテロ環式化合物残基、炭化水素置換シリル基、炭化水素置換シロキシ基、アルコキシ基、アルキルチオ基、アリーロキシ基、アリールチオ基、アシル基、エステル基、チオエステル基、アミド基、イミド基、アミノ基、イミノ基、スルホンエステル基、スルホンアミド基、シアノ基、ニトロ基、カルボキシル基、スルホ基、メルカプト基またはヒドロキシ基が好ましい。

【0023】ハロゲン原子としては、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素が挙げられる。炭化水素基として具体的には、メチル、エチル、n-プロピル、イソプロピル、n-ブチル、イソブチル、sec-ブチル、tert-ブチル、ネオペンチル、n-ヘキシルなどの炭素原子数が1~30、好ましくは1~20の直鎖状または分岐状のアルキル基；ビニル、アリル(allyl)、イソプロペニルなどの炭素原子数が2~30、好ましくは2~20の直鎖状または分岐状のアルケニル基；エチニル、プロパルギルなど炭素原子数が2~30、好ましくは2~20の直鎖状または分岐状のアルキニル基；シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、アダマンチルなどの炭素原子数が3~30、好ましくは3~20の環状飽和炭化水素基；シクロペンタジエニル、インデニル、フルオレニルなどの炭素数5~30の環状不飽和炭化水素基；フェニル、ベンジル、ナフチル、ビフェニル、ターフェニル、フェナントリル、アントラセニルなどの炭素原子数が6~30、好ましくは6~20のアリール(aryl)基；トリル、iso-プロピルフェニル、t-ブチルフェ

ニル、ジメチルフェニル、ジ-*tert*-ブチルフェニルなどのアルキル置換アリール基などが挙げられる。

【0024】上記炭化水素基は、水素原子がハロゲンで置換されていてもよく、たとえば、トリフルオロメチル、ペンタフルオロフェニル、クロロフェニルなどの炭素原子数1～30、好ましくは1～20のハロゲン化炭化水素基が挙げられる。また、上記炭化水素基は、水素原子が他の炭化水素基で置換されていてもよく、たとえば、ベンジル、クミルなどのアリール基置換アルキル基などが挙げられる。

【0025】さらにまた、上記炭化水素基は、ヘテロ環式化合物残基；アルコキシ基、アリーロキシ基、エステル基、エーテル基、アシル基、カルボキシ基、カルボナート基、ヒドロキシ基、ペルオキシ基、カルボン酸無水物基などの酸素含有基；アミノ基、イミノ基、アミド基、イミド基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、ニトロ基、ニトロソ基、シアノ基、イソシアノ基、シアン酸エステル基、アミジノ基、ジアゾ基、アミノ基がアンモニウム塩となったものなどの窒素含有基；ボランジール基、ボラントリール基、ジボラニル基などのホウ素含有基；メルカプト基、チオエステル基、ジチオエステル基、アルキルチオ基、アリールチオ基、チオアシル基、チオエーテル基、チオシアン酸エステル基、イソチアン酸エステル基、スルホンエステル基、スルホンアミド基、チオカルボキシ基、ジチオカルボキシ基、スルホ基、スルホニル基、スルフィニル基、スルフェニル基などのイオウ含有基；ホスフィド基、ホスホリル基、チオホスホリル基、ホスファート基などのリン含有基、ケイ素含有基、ゲルマニウム含有基、またはスズ含有基を有していてもよい。

【0026】これらのうち、特に、メチル、エチル、*n*-プロピル、イソプロピル、*n*-ブチル、イソブチル、*sec*-ブチル、*tert*-ブチル、ネオペンチル、*n*-ヘキシルなどの炭素原子数1～30、好ましくは1～20の直鎖状または分岐状のアルキル基；フェニル、ナフチル、ビフェニル、ターフェニル、フェナントリル、アントラセニルなどの炭素原子数6～30、好ましくは6～20のアリール基；これらのアリール基にハロゲン原子、炭素原子数1～30、好ましくは1～20のアルキル基またはアルコキシ基、炭素原子数6～30、好ましくは6～20のアリール基またはアリーロキシ基などの置換基が1～5個置換した置換アリール基などが好ましい。

【0027】ヘテロ環式化合物残基としては、ピロール、ピリジン、ピリミジン、キノリン、トリアジンなどの含窒素化合物、フラン、ピランなどの含酸素化合物、チオフェンなどの含硫黄化合物などの残基、およびこれらのヘテロ環式化合物残基に炭素原子数が1～30、好ましくは1～20のアルキル基、アルコキシ基などの置換基がさらに置換した基などが挙げられる。

【0028】 $R^1 \sim R^{14}$ として示される酸素含有基、窒

素含有基、ホウ素含有基、イオウ含有基、リン含有基としては、上記炭化水素基に含まれてもよい置換基として例示したものと同様のものが挙げられる。

【0029】ケイ素含有基としては、シリル基、シロキシ基、炭化水素置換シリル基、炭化水素置換シロキシ基など、具体的には、メチルシリル、ジメチルシリル、トリメチルシリル、エチルシリル、ジエチルシリル、トリエチルシリル、ジフェニルメチルシリル、トリフェニルシリル、ジメチルフェニルシリル、ジメチル-*tert*-ブチルシリル、ジメチル（ペンタフルオロフェニル）シリルなどが挙げられる。これらの中では、メチルシリル、ジメチルシリル、トリメチルシリル、エチルシリル、ジエチルシリル、トリエチルシリル、ジメチルフェニルシリル、トリフェニルシリルなどが好ましい。特にトリメチルシリル、トリエチルシリル、トリフェニルシリル、ジメチルフェニルシリルが好ましい。炭化水素置換シロキシ基として具体的には、トリメチルシロキシなどが挙げられる。ゲルマニウム含有基およびスズ含有基としては、前記ケイ素含有基のケイ素をゲルマニウムおよびスズに置換したものが挙げられる。

【0030】次に上記で説明した $R^1 \sim R^{14}$ の例について、より具体的に説明する。酸素含有基のうち、アルコキシ基としては、メトキシ、エトキシ、*n*-プロポキシ、イソプロポキシ、*n*-ブトキシ、イソブトキシ、*tert*-ブトキシなどが、アリーロキシ基としては、フェノキシ、2,6-ジメチルフェノキシ、2,4,6-トリメチルフェノキシなどが、アシル基としては、ホルミル基、アセチル基、ベンゾイル基、*p*-クロロベンゾイル基、*p*-メトキシベンゾイル基などが、エステル基としては、アセチルオキシ、ベンゾイルオキシ、メトキシカルボニル、フェノキシカルボニル、*p*-クロロフェノキシカルボニルなどが好ましく例示される。

【0031】窒素含有基のうち、アミド基としては、アセトアミド、*N*-メチルアセトアミド、*N*-メチルベンズアミドなどが、アミノ基としては、ジメチルアミノ、エチルメチルアミノ、ジフェニルアミノなどが、イミド基としては、アセトイミド、ベンズイミドなどが、イミノ基としては、メチルイミノ、エチルイミノ、プロピルイミノ、ブチルイミノ、フェニルイミノなどが好ましく例示される。

【0032】イオウ含有基のうち、アルキルチオ基としては、メチルチオ、エチルチオ等が、アリールチオ基としては、フェニルチオ、メチルフェニルチオ、ナフチルチオ等が、チオエステル基としては、アセチルチオ、ベンゾイルチオ、メチルチオカルボニル、フェニルチオカルボニルなどが、スルホンエステル基としては、スルホン酸メチル、スルホン酸エチル、スルホン酸フェニルなどが、スルホンアミド基としては、フェニルスルホンアミド、*N*-メチルスルホンアミド、*N*-メチル-*p*-トルエンスルホンアミドなどが好ましく挙げられる。

【0033】Aが、酸素原子、イオウ原子またはセレン原子の場合、R⁴は水素以外の置換基であることが好ましい。すなわち、R⁴は、ハロゲン原子、炭化水素基、ヘテロ環式化合物残基、酸素含有基、ホウ素含有基、イオウ含有基、ケイ素含有基、ゲルマニウム含有基またはスズ含有基が好ましい。特に、R⁴は、ハロゲン原子、炭化水素基、ヘテロ環式化合物残基、炭化水素置換シリル基、炭化水素置換シロキシ基、アルコキシ基、アルキルチオ基、アリーロキシ基、アリールチオ基、アシル基、エステル基、チオエステル基、アミド基、アミノ基、イミド基、イミノ基、スルホンエステル基、スルホンアミド基、シアノ基、ニトロ基またはヒドロキシ基であることが好ましい。

【0034】Aが、酸素原子、イオウ原子またはセレン原子の場合、R⁴として好ましい炭化水素基としては、メチル、エチル、n-プロピル、イソプロピル、n-ブチル、イソブチル、sec-ブチル、tert-ブチル、チオペンチル、n-ヘキシルなどの炭素原子数が1~30、好ましくは1~20の直鎖状または分岐状のアルキル基；シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、アダマンチルなどの炭素原子数が3~30、好ましくは3~20の環状飽和炭化水素基；フェニル、ベンジル、ナフチル、ビフェニル、トリフェニルなどの炭素原子数が6~30、好ましくは6~20のアリール基；および、これらの基に炭素原子数が1~30、好ましくは1~20のアルキル基またはアルコキシ基、炭素原子数が1~30、好ましくは1~20のハロゲン化アルキル基、炭素原子数が6~30、好ましくは6~20のアリール基またはアリーロキシ基、ハロゲン、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシ基などの置換基がさらに置換した基などが好ましく挙げられる。

【0035】また、Aが、酸素原子、イオウ原子またはセレン原子の場合、R⁴として好ましい炭化水素置換シリル基としては、メチルシリル、ジメチルシリル、トリメチルシリル、エチルシリル、ジエチルシリル、トリエチルシリル、ジフェニルメチルシリル、トリフェニルシリル、ジメチルフェニルシリル、ジメチル-tert-ブチルシリル、ジメチル（ペンタフルオロフェニル）シリルなどが挙げられる。特に好ましくは、トリメチルシリル、トリエチルフェニル、ジフェニルメチルシリル、イソフェニルシリル、ジメチルフェニルシリル、ジメチル-tert-ブチルシリル、ジメチル（ペンタフルオロフェニル）シリルなどが挙げられる。

【0036】R¹~R¹⁴は、これらのうちの2個以上の基、好ましくは隣接する基が互いに連結して脂肪環、芳香環または、窒素原子などの異原子を含む炭化水素環を形成していてもよく、これらの環はさらに置換基を有していてもよい。

【0037】また、mが2以上の場合には、一つの配位子に含まれるR¹~R¹⁴のうちの1個の基と、他の配位

子に含まれるR¹~R¹⁴のうちの1個の基とが結合されていていてもよい。R¹⁰同士、R¹¹同士、R¹²同士、R¹³同士またはR¹⁴同士が結合される場合は、その結合の主鎖が3個以上の原子で形成されるものが好ましい。さらに、R¹同士、R²同士、R³同士、R⁴同士、R⁵同士、R⁶同士、R⁷同士、R⁸同士、R⁹同士、R¹⁰同士、R¹¹同士、R¹²同士、R¹³同士、R¹⁴同士は互いに同一でも異なってもよい。

【0038】Xは、水素原子、ハロゲン原子、炭化水素基、酸素含有基、イオウ含有基、窒素含有基、ホウ素含有基、アルミニウム含有基、リン含有基、ハロゲン含有基、ヘテロ環式化合物残基、ケイ素含有基、ゲルマニウム含有基、またはスズ含有基を示す。nは、Mの価数を満たす数であり、具体的には0~5、好ましくは1~4、より好ましくは1~3の整数である。なお、nが2以上の場合には、複数のXは互いに同一であっても、異なってもよい。

【0039】ここで、ハロゲン原子としては、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素が挙げられる。炭化水素基としては、前記R¹~R¹⁴で例示したものと同様のものが挙げられる。具体的には、メチル、エチル、プロピル、ブチル、ヘキシル、オクチル、ノニル、ドデシル、アイコシルなどのアルキル基；シクロペンチル、シクロヘキシル、ノルボルニル、アダマンチルなどの炭素原子数が3~30のシクロアルキル基；ビニル、プロペニル、シクロヘキセニルなどのアルケニル基；ベンジル、フェニルエチル、フェニルプロピルなどのアリールアルキル基；フェニル、トリル、ジメチルフェニル、トリメチルフェニル、エチルフェニル、プロピルフェニル、ビフェニル、ナフチル、メチルナフチル、アントリル、フェナントリルなどのアリール基などが挙げられるが、これらに限定されるものではない。また、これらの炭化水素基には、ハロゲン化炭化水素、具体的には炭素原子数1~20の炭化水素基の少なくとも一つの水素がハロゲンに置換した基も含まれる。これらのうち、炭素原子数が1~20のものが好ましい。

【0040】ヘテロ環式化合物残基としては、前記R¹~R¹⁴で例示したものと同様のものが挙げられる。

【0041】酸素含有基としては、前記R¹~R¹⁴で例示したものと同様のものが挙げられ、具体的には、ヒドロキシ基；メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシなどのアルコキシ基；フェノキシ、メチルフェノキシ、ジメチルフェノキシ、ナフトキシなどのアリーロキシ基；フェニルメトキシ、フェニルエトキシなどのアリールアルコキシ基；アセトキシ基；カルボニル基などが挙げられるが、これらに限定されるものではない。

【0042】イオウ含有基としては、前記R¹~R¹⁴で例示したものと同様のものが挙げられ、具体的には、メチルスルフォネート、トリフルオロメタンスルフォネート、フェニルスルフォネート、ベンジルスルフォネー

ト、p-トルエンスルフォネート、トリメチルベンゼンスルフォネート、トリイソブチルベンゼンスルフォネート、p-クロルベンゼンスルフォネート、ペンタフルオロベンゼンスルフォネートなどのスルフォネート基；メチルスルフィネート、フェニルスルフィネート、ベンジルスルフィネート、p-トルエンスルフィネート、トリメチルベンゼンスルフィネート、ペンタフルオロベンゼンスルフィネートなどのスルフィネート基；アルキルチオ基；アリールチオ基などが挙げられるが、これらに限定されるものではない。

【0043】窒素含有基として具体的には、前記 $R^1 \sim R^{14}$ で例示したものと同様のものが挙げられ、具体的には、アミノ基；メチルアミノ、ジメチルアミノ、ジエチルアミノ、ジプロピルアミノ、ジブチルアミノ、ジシクロヘキシルアミノなどのアルキルアミノ基；フェニルアミノ、ジフェニルアミノ、ジトリルアミノ、ジナフチルアミノ、メチルフェニルアミノなどのアリールアミノ基またはアルキルアリールアミノ基などが挙げられるが、これらに限定されるものではない。

【0044】ホウ素含有基として具体的には、 BR_4 （Rは水素、アルキル基、置換基を有してもよいアリール基、ハロゲン原子等を示す）が挙げられる。リン含有基として具体的には、トリメチルホスフィン、トリブチルホスフィン、トリシクロヘキシルホスフィンなどのトリアルキルホスフィン基；トリフェニルホスフィン、トリトリルホスフィンなどのトリアリールホスフィン基；メチルホスファイト、エチルホスファイト、フェニルホスファイトなどのホスファイト基（ホスフィド基）；ホスホン酸基；ホスフィン酸基などが挙げられるが、これらに限定されるものではない。

【0045】ケイ素含有基として具体的には、前記 $R^1 \sim R^{14}$ で例示したものと同様のものが挙げられ、具体的には、フェニルシリル、ジフェニルシリル、トリメチルシリル、トリエチルシリル、トリプロピルシリル、トリ

シクロヘキシルシリル、トリフェニルシリル、メチルジフェニルシリル、トリトリルシリル、トリナフチルシリルなどの炭化水素置換シリル基；トリメチルシリルエーテルなどの炭化水素置換シリルエーテル基；トリメチルシリルメチルなどのケイ素置換アルキル基；トリメチルシリルフェニルなどのケイ素置換アリール基などが挙げられる。

【0046】ゲルマニウム含有基として具体的には、前記 $R^1 \sim R^{14}$ で例示したものと同様のものが挙げられ、具体的には、前記ケイ素含有基のケイ素をゲルマニウムに置換した基が挙げられる。

【0047】スズ含有基としては、前記 $R^1 \sim R^{14}$ で例示したものと同様のものが挙げられ、より具体的には、前記ケイ素含有基のケイ素をスズに置換した基が挙げられる。

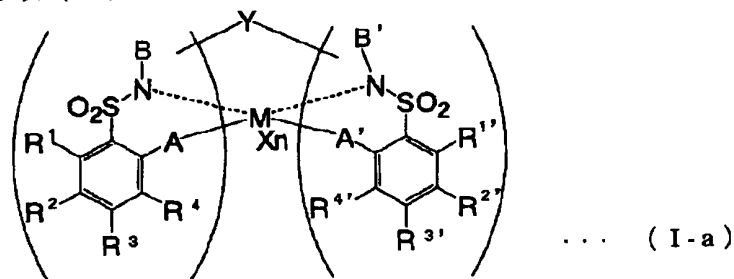
【0048】ハロゲン含有基として具体的には、 $P F_6$ 、 $B F_4$ などのフッ素含有基、 $C l O_4$ 、 $S b C l_6$ などの塩素含有基、 $I O_4$ などのヨウ素含有基が挙げられるが、これらに限定されるものではない。

【0049】アルミニウム含有基として具体的には、 $A l R_4$ （Rは水素、アルキル基、置換基を有してもよいアリール基、ハロゲン原子等を示す）が挙げられるが、これらに限定されるものではない。

【0050】なお、nが2以上の場合には、Xで示される複数の基は互いに同一でも異なっていてもよく、またXで示される複数の基は互いに結合して環を形成してもよい。

【0051】前記一般式（I）で表される遷移金属化合物において、mが2であり、一つの配位基に含まれる $R^1 \sim R^{14}$ のうちの1個の基と、他の配位基に含まれる $R^1 \sim R^{14}$ のうちの1個の基とが連結されている化合物は、たとえば下記一般式（I-a）で表される化合物である。

【化10】



式（I-a）中、M、A、 $R^1 \sim R^{14}$ 、Xは、それぞれ前記一般式（I）の場合と同じであり、A'はAと同一でも異なっていてもよい酸素原子、イオウ原子、セレン原子、または、結合基として $-R^{15}$ を有する窒素原子を示す。B'はBと同一でも異なっていてもよく、Nの結合基として、 $-R^{10'}$ および $-R^{11'}$ 、 $=C(R^{12'})R^{13'}$ 、または $=NR^{14'}$ （ここで、 $-$ は単結合を、 $=$ は二重結

合を表す）を示す。 $R^{1'} \sim R^{14'}$ はそれぞれ $R^1 \sim R^{14}$ と同じであり、特に好ましくは以下のような基が挙げられる。

【0052】 $R^{1'} \sim R^{14'}$ は、互いに同一でも異なっていてもよく、水素原子、ハロゲン原子、炭化水素基、ヘテロ環式化合物残基、酸素含有基、窒素含有基、ホウ素含有基、イオウ含有基、リン含有基、ケイ素含有基、ゲ

ルマニウム含有基、またはスズ含有基を示し、具体的には $R^1 \sim R^{14}$ と同様の原子または基を示す。 $R^{1'} \sim R^{14'}$ のうちの2個以上の基、好ましくは隣接する基は互いに連結して脂肪族環、芳香族環または窒素原子などの異原子を含む炭化水素環を形成していてもよい。

【0053】Yは、 $R^1 \sim R^{14}$ から選ばれる少なくとも1以上の基と、 $R^{1'} \sim R^{14'}$ から選ばれる少なくとも1以上の基とを結合する結合基または単結合である。結合基は特に制限されるものではないが、好ましくは主鎖が原子3個以上、より好ましくは4個以上20個以下、特に好ましくは4個以上10個以下で構成された構造を有する。なお、この結合基は置換基を有していてもよい。

【0054】Yで示される結合基としては、酸素、イオウ、炭素、窒素、リン、ケイ素、セレン、スズ、ホウ素などの中から選ばれる少なくとも1種の元素を含む基が挙げられ、具体的には $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-Se-$ などのカルコゲン原子含有基； $-NH-$ 、 $-N(CH_3)_2-$ 、 $-PH-$ 、 $-P(CH_3)_2-$ などの窒素またはリン原子含有基； $-CH_2-$ 、 $-CH_2-CH_2-$ 、 $-C(CH_3)_2-$ などの炭素原子数が1～20の炭化水素基；ベンゼン、ナフタレン、アントラセンなどの炭素原子数が6～20の環状不飽和炭化水素残基；ピリジン、キノリン、チオフェン、フランなどのヘテロ原子を含む炭素原子数が3～20のヘテロ環式化合物残基； $-SiH_2-$ 、 $-Si(CH_3)_2-$ などのケイ素原子含有基、 $-SnH_2-$ 、 $-Sn(CH_3)_2-$ などのスズ原子含有基； $-BH-$ 、 $-B(CH_3)-$ 、 $-BF-$ などのホウ素原子含有基など、または単結合が挙げられる。

【0055】以下に、前記一般式(I)で表される遷移金属化合物の具体的な例を示すが、これらに限定される

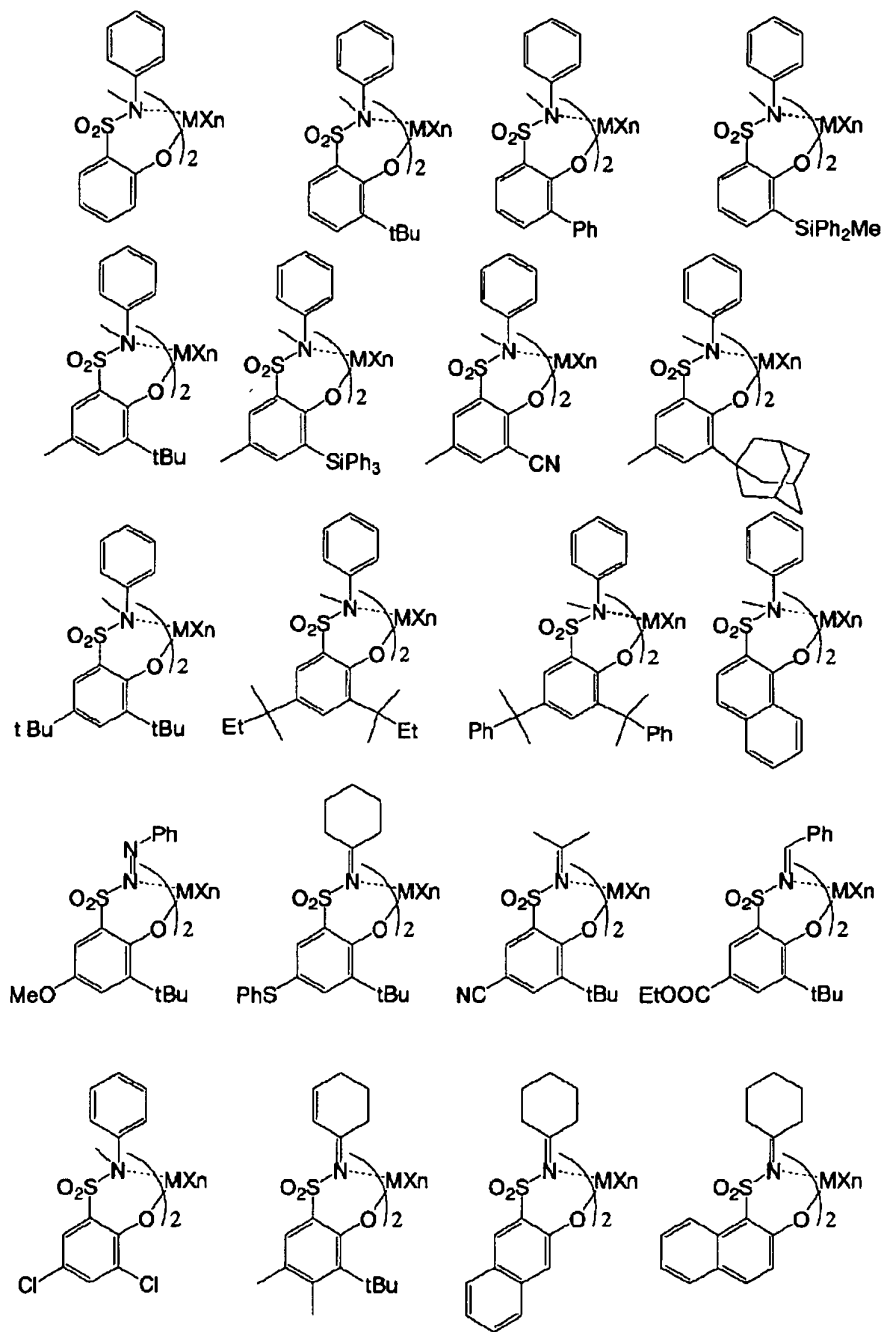
ものではない。なお、下記具体例においてMは周期律表第3～11族の遷移金属原子であり、具体例としてはスカンジウム、イットリウム、ランタノイド、チタン、ジルコニウム、ハフニウム、バナジウム、ニオブ、タンタル、クロム、モリブデン、タングステン、マンガン、レニウム、鉄、ルテニウム、コバルト、ロジウム、ニッケル、パラジウムなどであり、好ましくはスカンジウム、ランタノイド、チタン、ジルコニウム、ハフニウム、バナジウム、ニオブ、タンタル、鉄、コバルト、ロジウム、ニッケル、パラジウムなどであり、より好ましくは、チタン、ジルコニウム、ハフニウム、バナジウム、ニオブ、タンタル、鉄、コバルト、ロジウムなどであり、特に好ましくはチタン、ジルコニウム、ハフニウムである。

【0056】Xは、Cl、Br等のハロゲン、もしくはメチル等のアルキル基を示すが、これらに限定されるものではない。また、Xが複数ある場合は、これらは同じであっても、異なってもよい。

【0057】nは金属Mの価数により決定される。例えば、2種のモノアニオン種が金属に結合している場合、2価金属では $n=0$ 、3価金属では $n=1$ 、4価金属では $n=2$ 、5価金属では $n=3$ になる。金属がTi(IV)の場合は、 $n=2$ となり、Zr(IV)の場合は、 $n=2$ となり、Hf(IV)の場合は、 $n=2$ となる。また、化合物の例示中、Meはメチル基、Etはエチル基、iPrはi-プロピル基、tBuはtert-ブチル基、Phはフェニル基を示す。

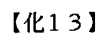
【0058】

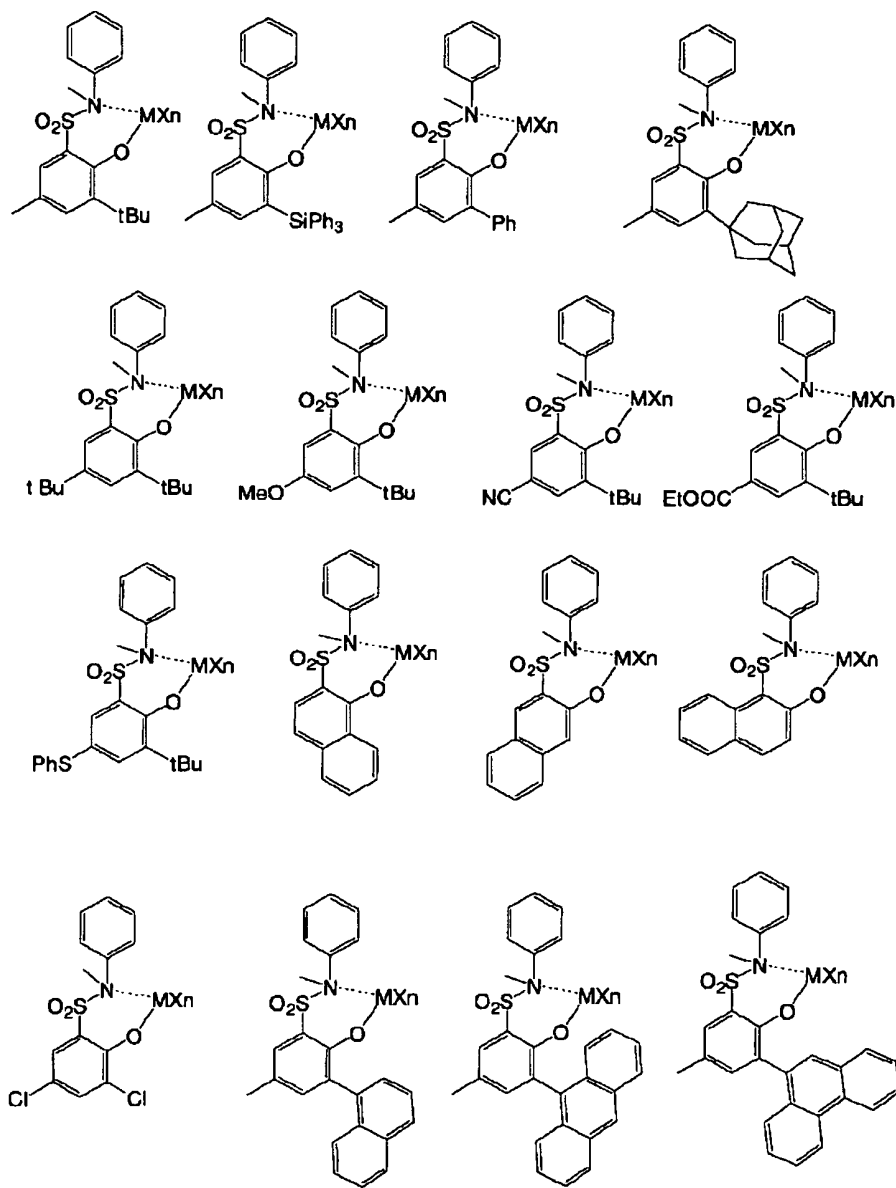
【化11】



【0059】

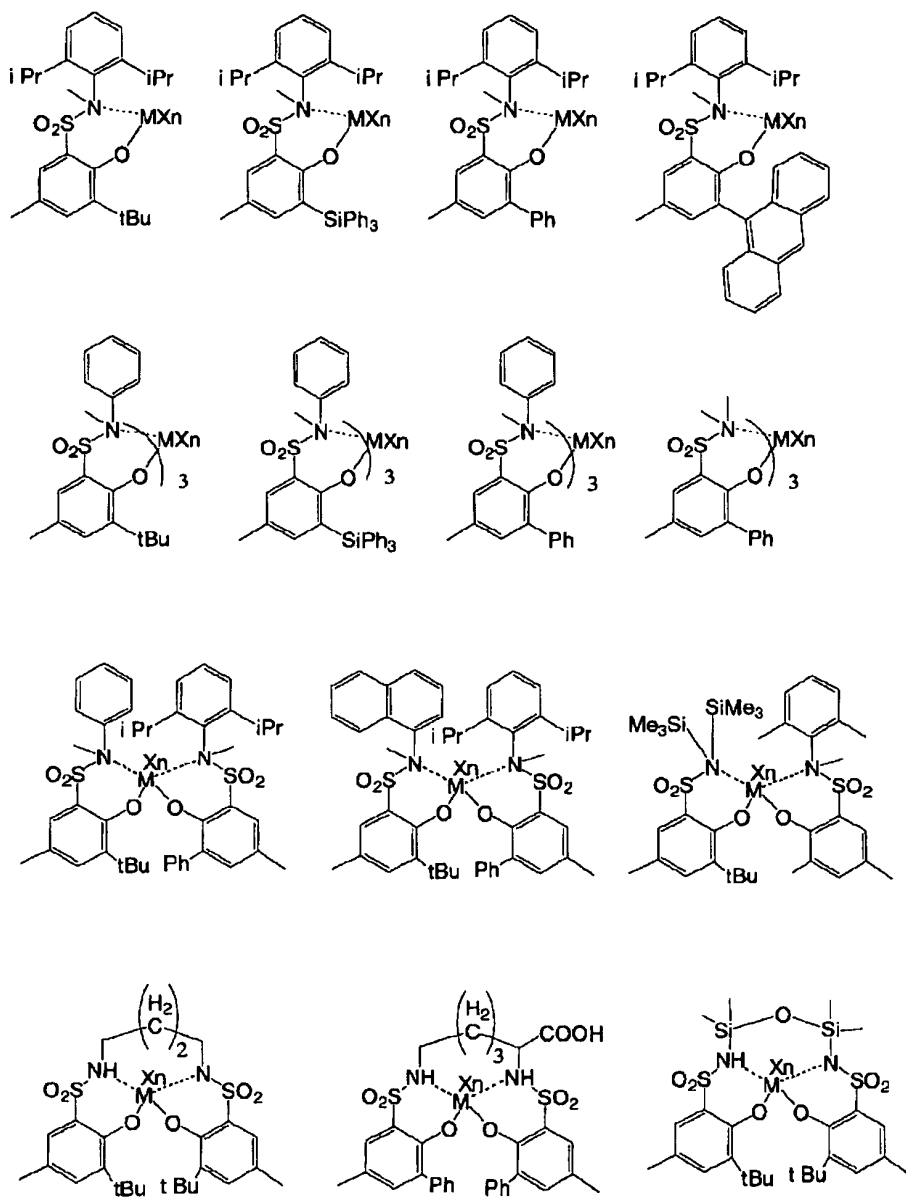
【化12】





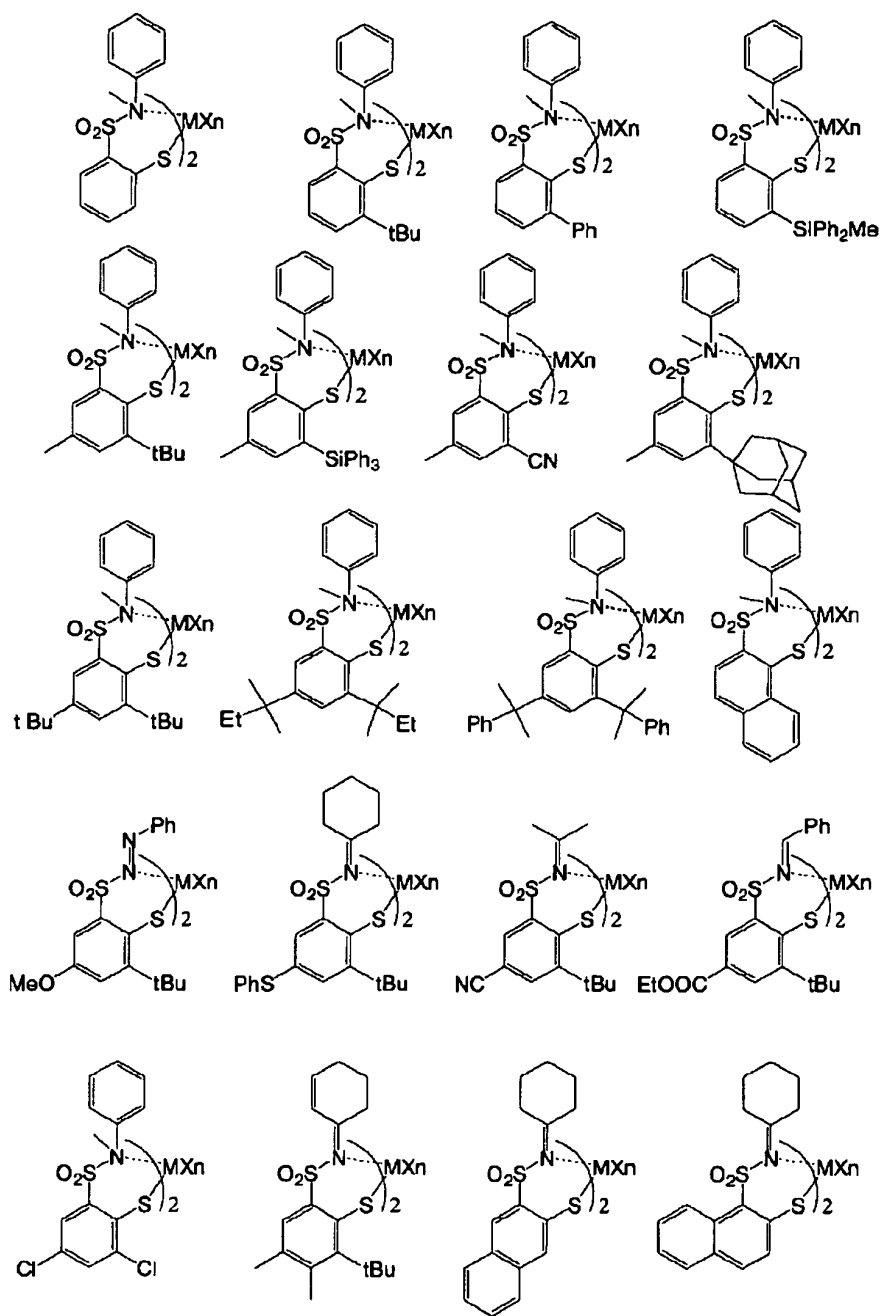
【0061】

【化14】



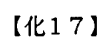
【0062】

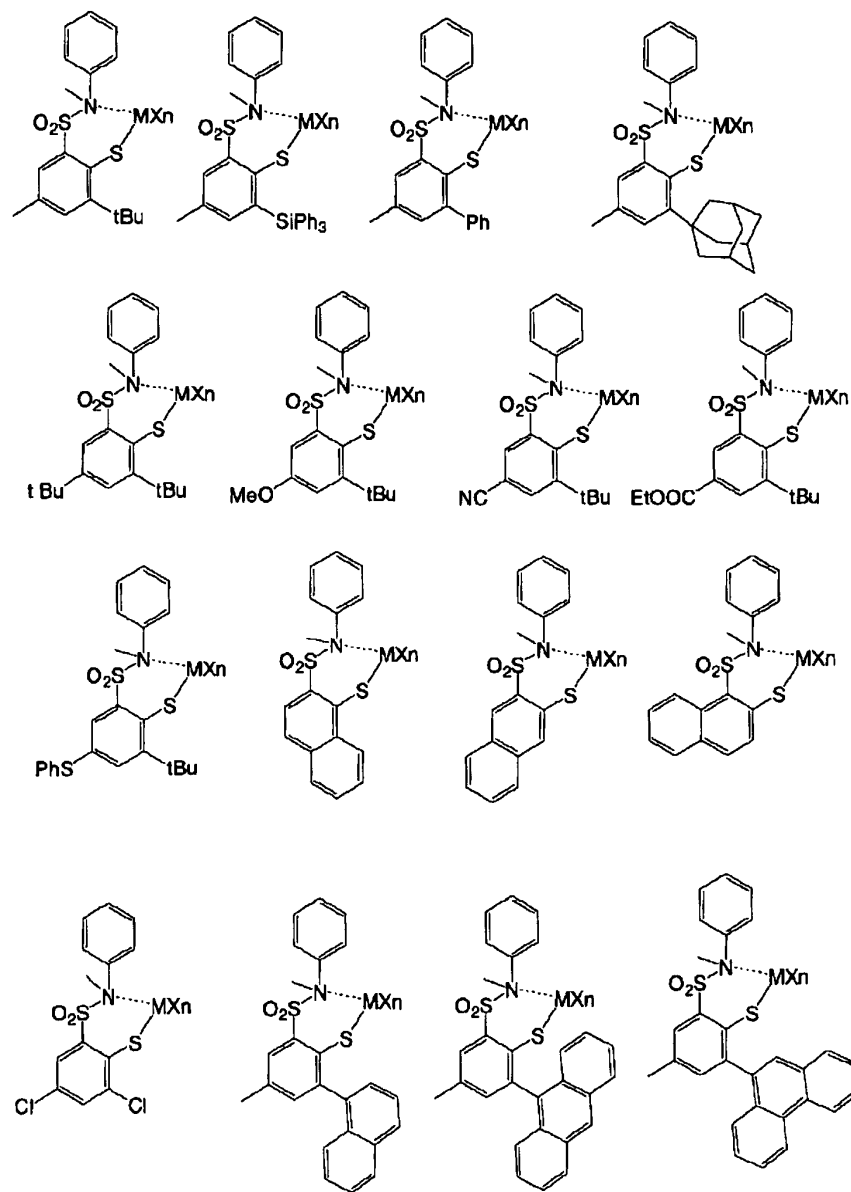
【化15】



【0063】

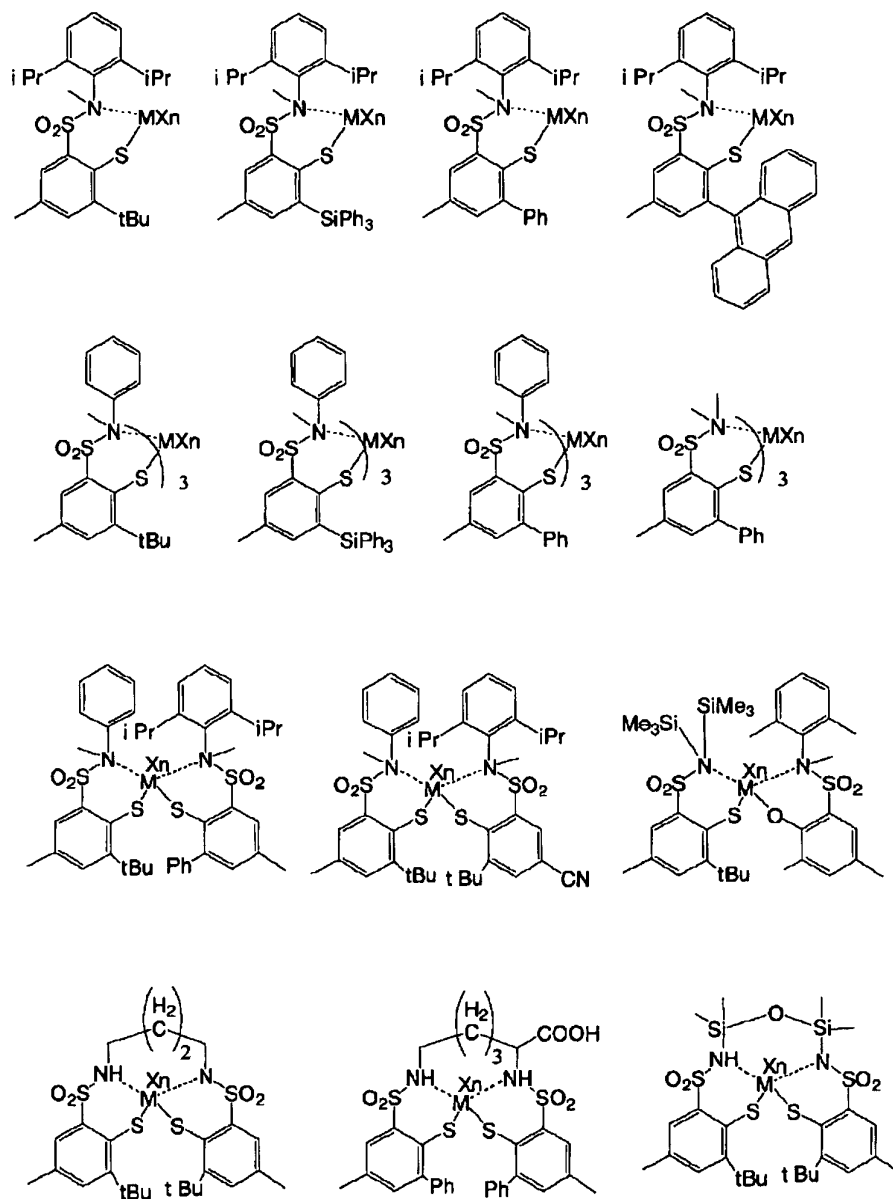
【化16】





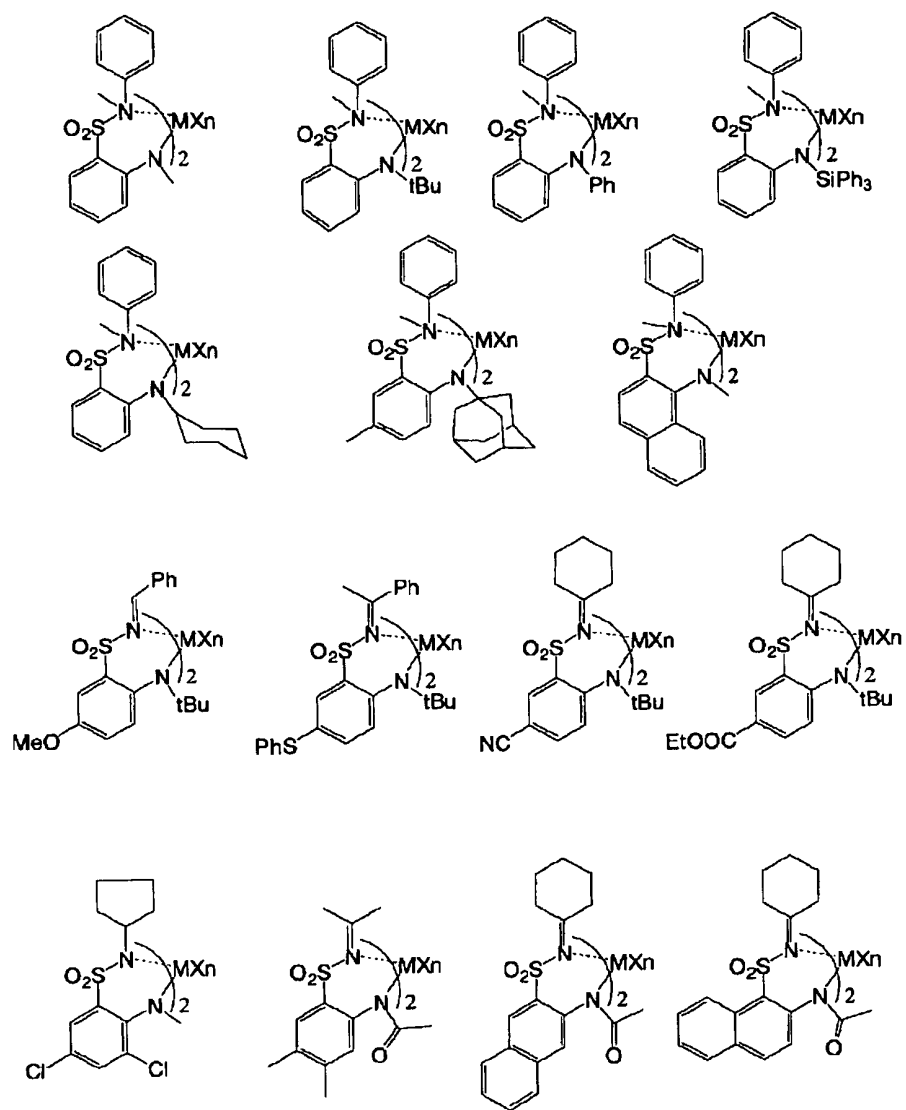
【0065】

【化18】



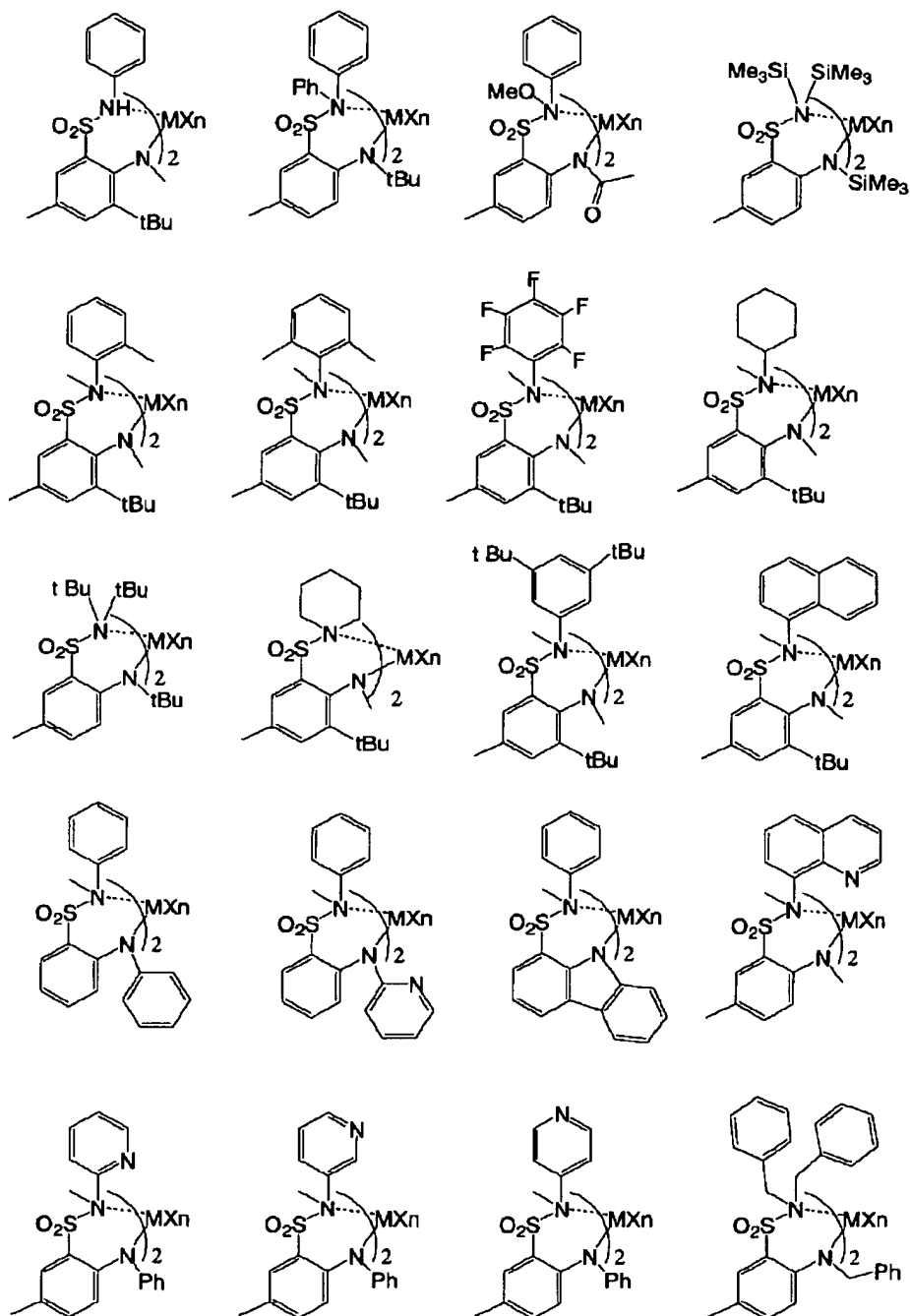
【0066】

【化19】



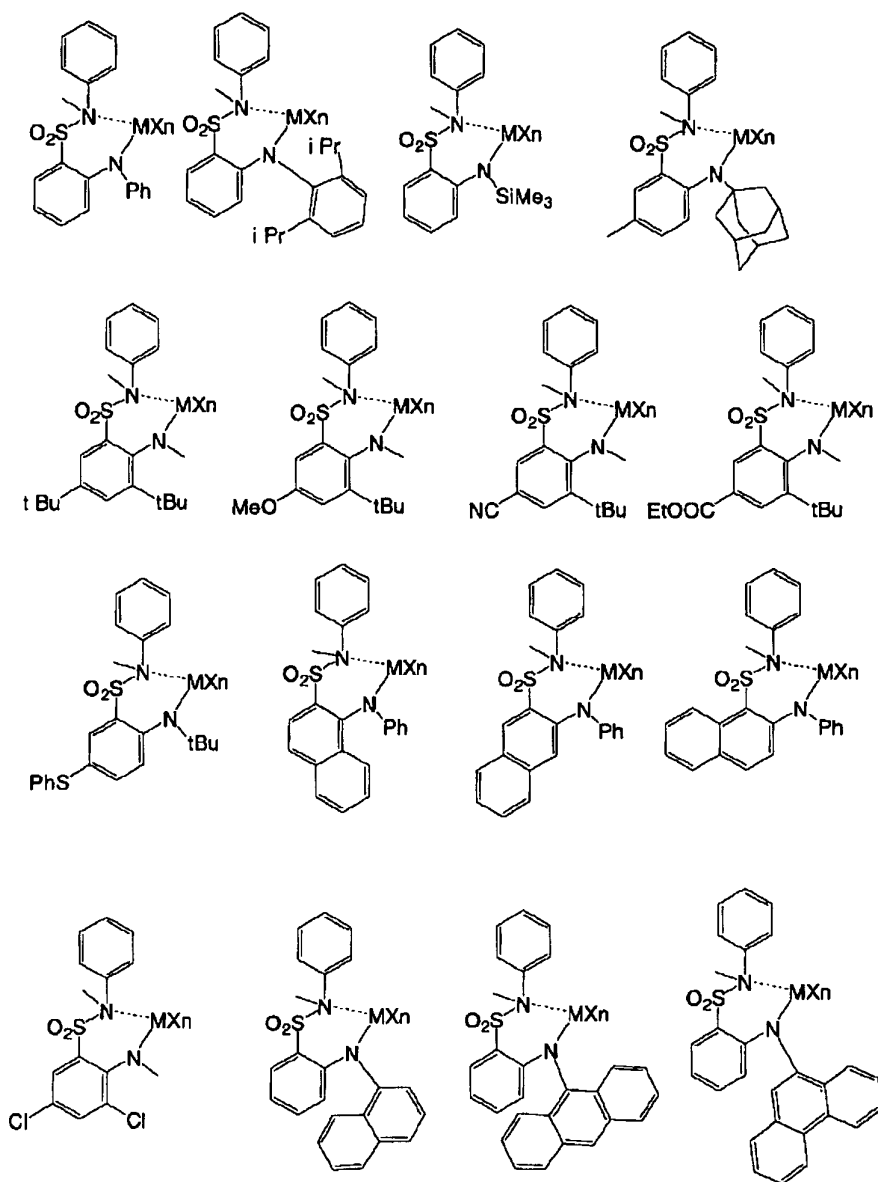
【0067】

【化20】



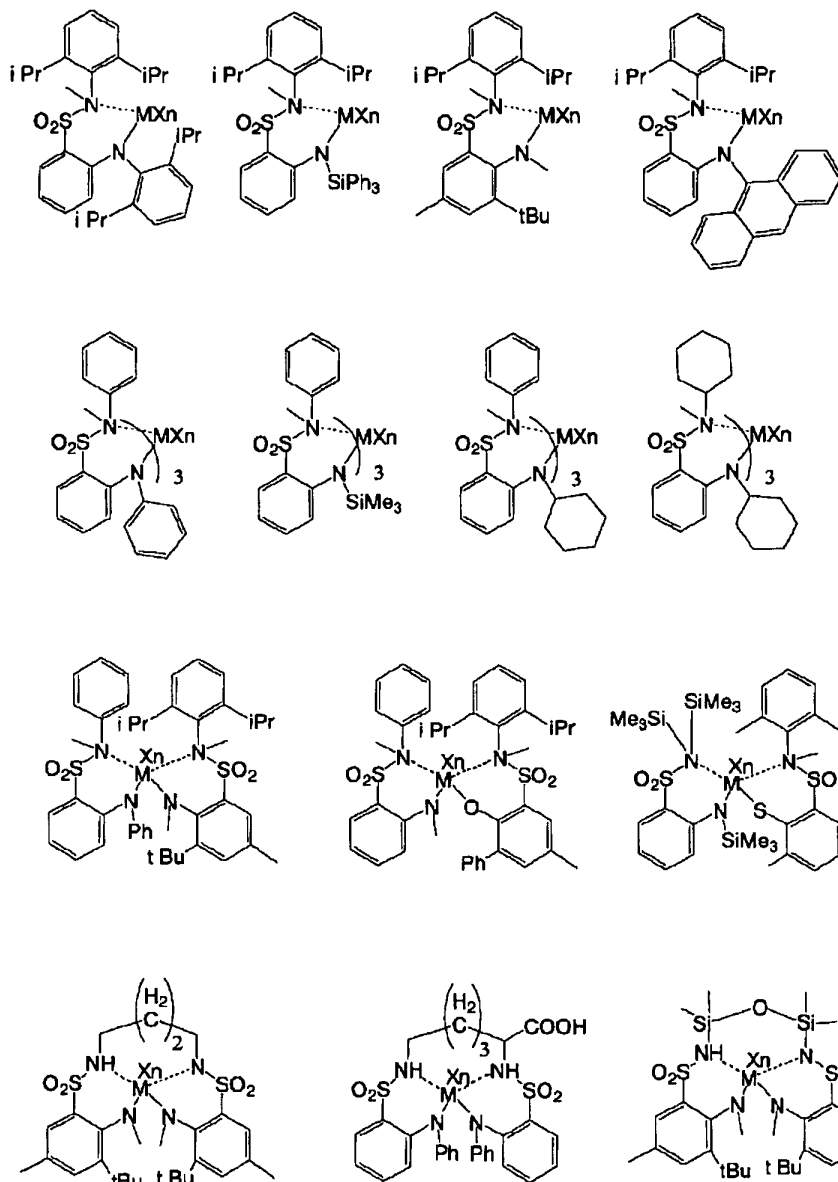
【0068】

【化21】



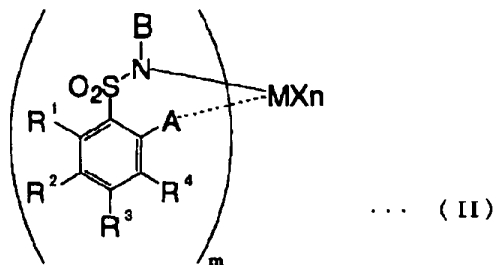
【0069】

【化22】



【0070】本発明で用いられる第2の遷移金属化合物は、下記一般式(II)で表される化合物である。

【化23】



(なお、ここでA……Mは配位していることを示すが、

この化合物においてはA……Mが配位していないものも含む。)

【0071】式(II)中、Mは周期律表第3～11族の遷移金属原子(3族にはランタノイドも含まれる)を示し、好ましくは3～10族(3族にはランタノイドも含まれる)の金属原子であり、より好ましくは3～5族および8～10族の金属原子であり、特に好ましくは4族または5族の金属原子である。具体的には、式(I)で示した金属が挙げられる。

【0072】mは、1～6、好ましくは1～4、さらに好ましくは1～2の整数を示す。Aは、結合基-R⁵を有する酸素原子、イオウ原子、セレン原子、または、結合基として、-R⁵および-R⁶、=C(R⁷)R⁸、または

$=NR^9$ を有する窒素原子を示し、Bは、Nの結合基として $-R^{10}$ を示す。

【0073】 $R^1 \sim R^{10}$ は、互いに同一でも異なってもよく、水素原子、ハロゲン原子、炭化水素基、ヘテロ環式化合物残基、酸素含有基、窒素含有基、ホウ素含有基、イオウ含有基、リン含有基、ケイ素含有基、ゲルマニウム含有基、またはスズ含有基を示し、これらのうちの2個以上が互いに連結して環を形成していてもよい。具体的には、前述の式(I)の $R^1 \sim R^{10}$ と同様の基が挙げられる。Xは、前述の式(I)と同様のものを示す。なお、nが2以上の場合、複数のXは互いに同一であっても異なってもよく、またXで示される複数の基は互いに結合して環を形成してもよい。

【0074】前記一般式(II)で表される遷移金属化合物において、mが2であり、一つの配位子に含まれる $R^1 \sim R^{10}$ のうちの1個の基と、他の配位子に含まれる $R^1 \sim R^{10}$ のうちの1個の基とが連結されている化合物は、前述の式(I-a)の場合と同様な構造のものを例示することができる。

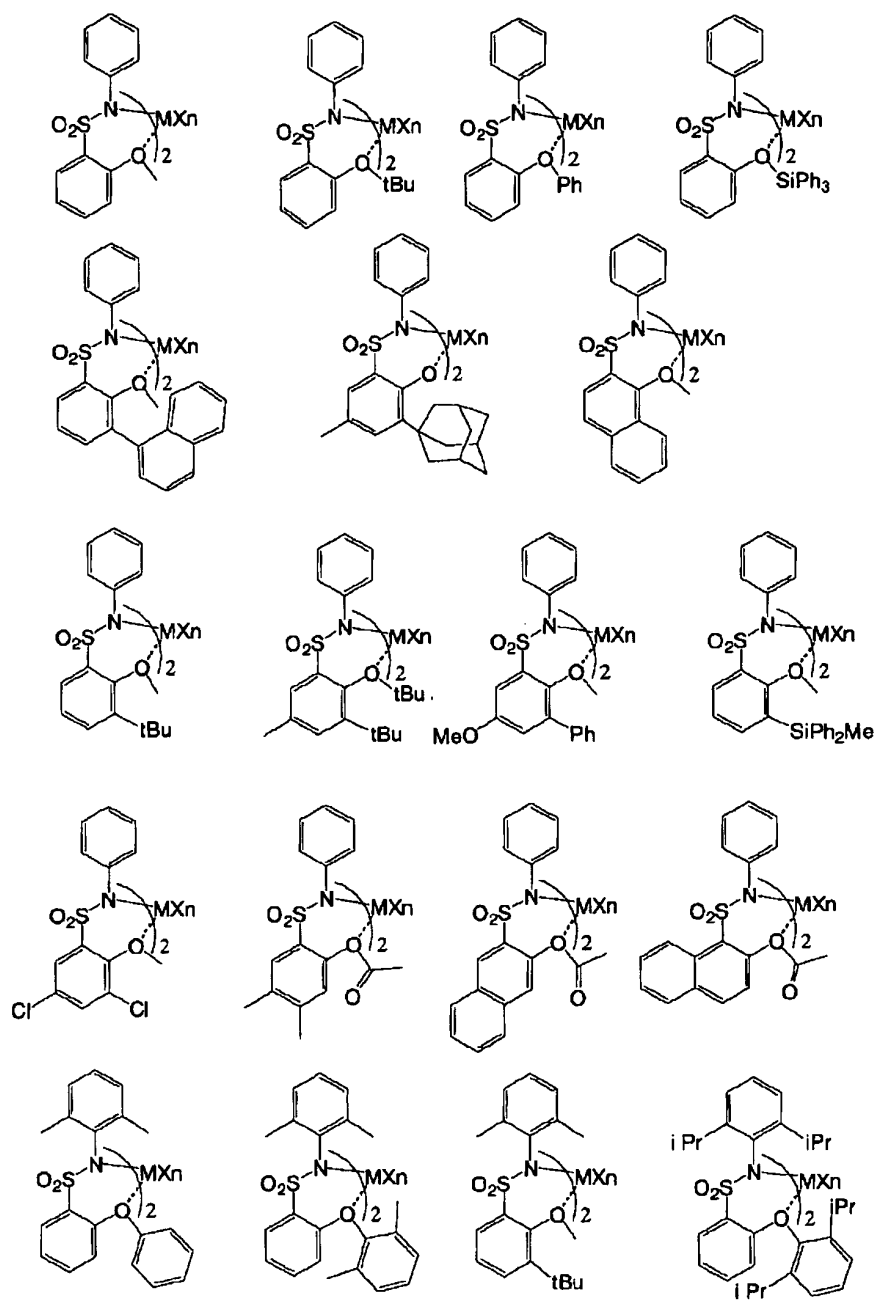
【0075】以下に、上記一般式(II)で表される遷移金属化合物の具体的な例を示すが、これらに限定される

ものではない。なお、下記具体例において、Mは周期律表第3～11族の遷移金属原子であり、具体例としてはスカンジウム、イットリウム、ランタノイド、チタン、ジルコニウム、ハフニウム、バナジウム、ニオブ、タンタル、クロム、モリブデン、タングステン、マンガン、レニウム、鉄、ルテニウム、コバルト、ロジウム、ニッケル、パラジウムなどであり、好ましくはスカンジウム、ランタノイド、チタン、ジルコニウム、ハフニウム、バナジウム、ニオブ、タンタル、鉄、コバルト、ロジウム、ニッケル、パラジウムなどであり、より好ましくは、チタン、ジルコニウム、ハフニウム、バナジウム、ニオブ、タンタル、鉄、コバルト、ロジウムなどであり、特に好ましくはチタン、ジルコニウム、ハフニウムである。

【0076】Xは、Cl、Br等のハロゲン、もしくはメチル等のアルキル基を示すが、これらに限定されるものではない。また、Xが複数ある場合は、これらは同じであっても、異なってもよい。nは第1の遷移金属化合物と同様に、金属Mの価数により決定される。

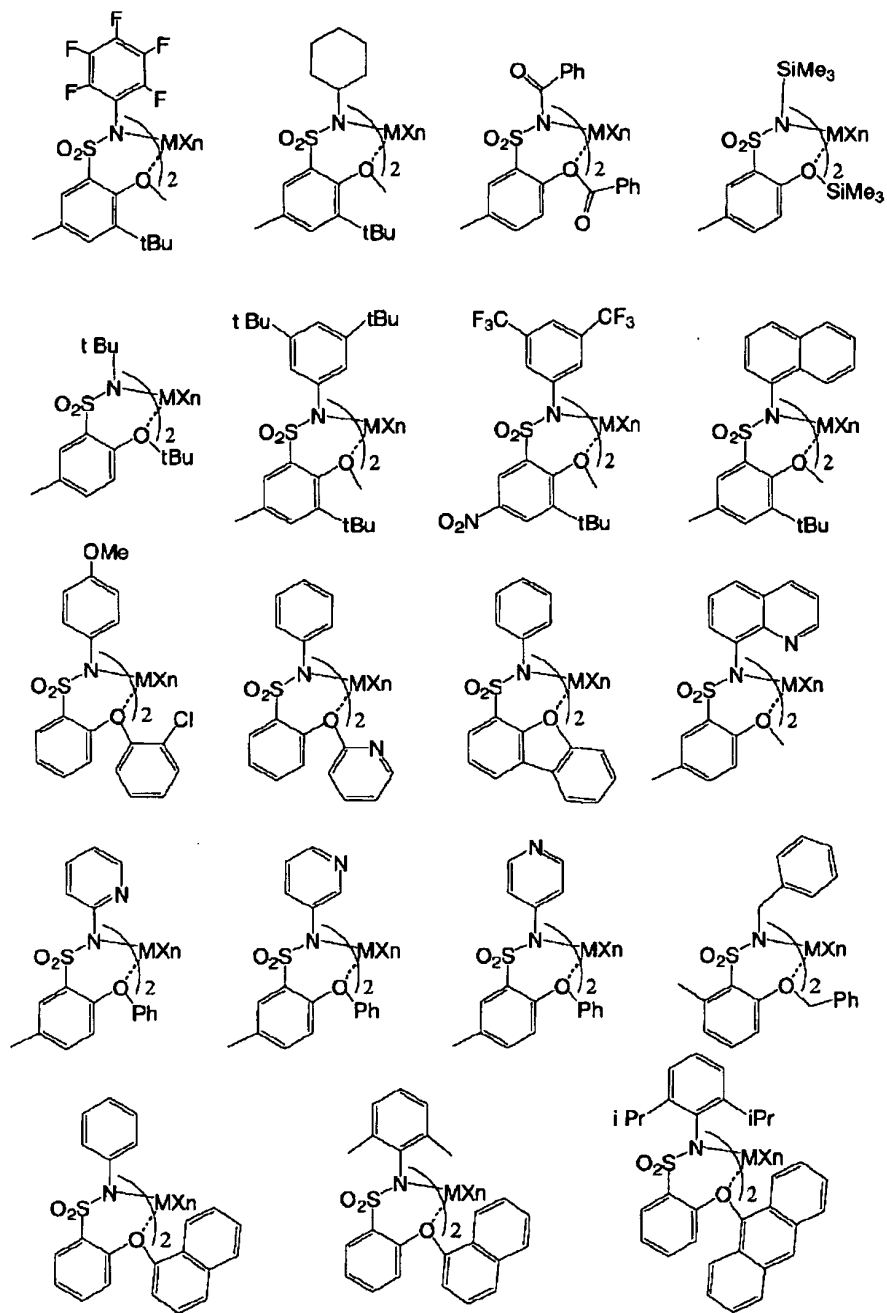
【0077】

【化24】



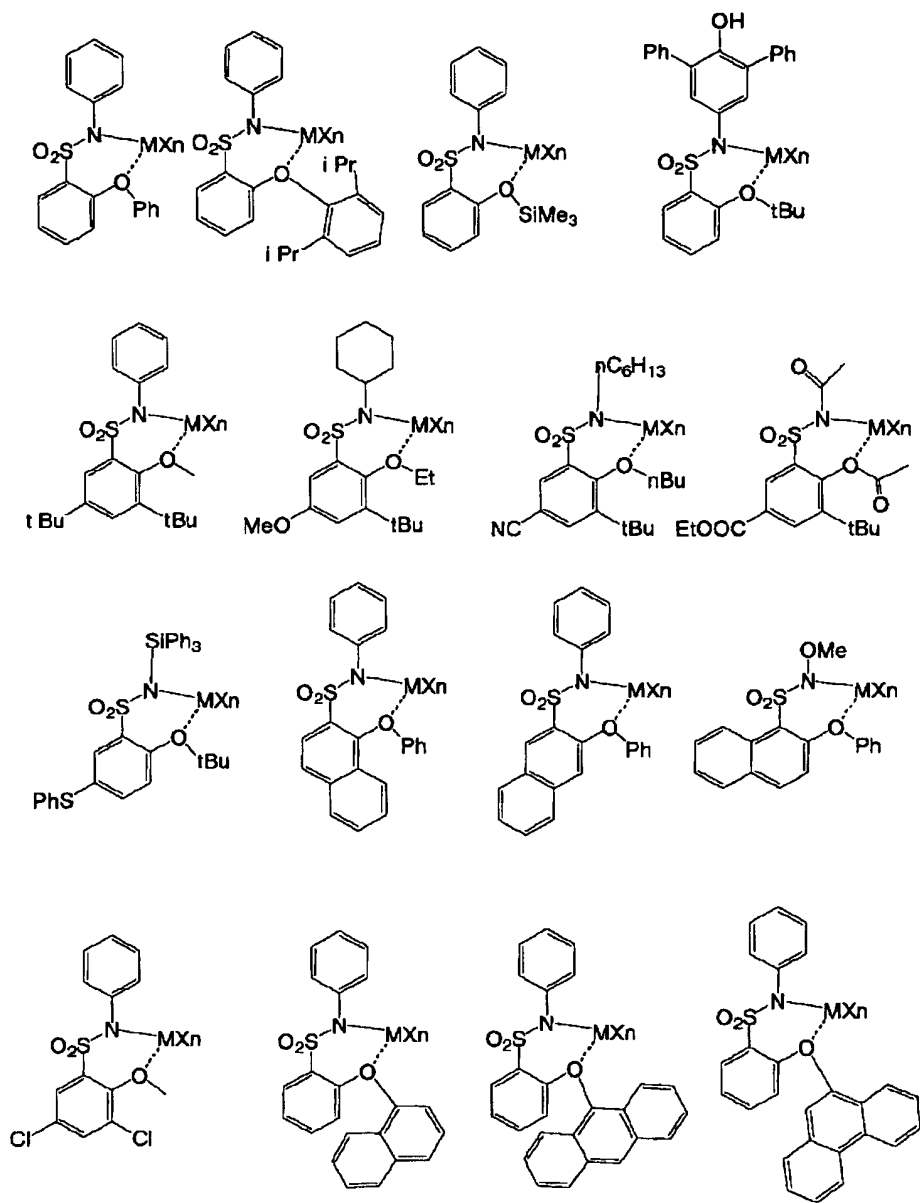
【0078】

【化25】



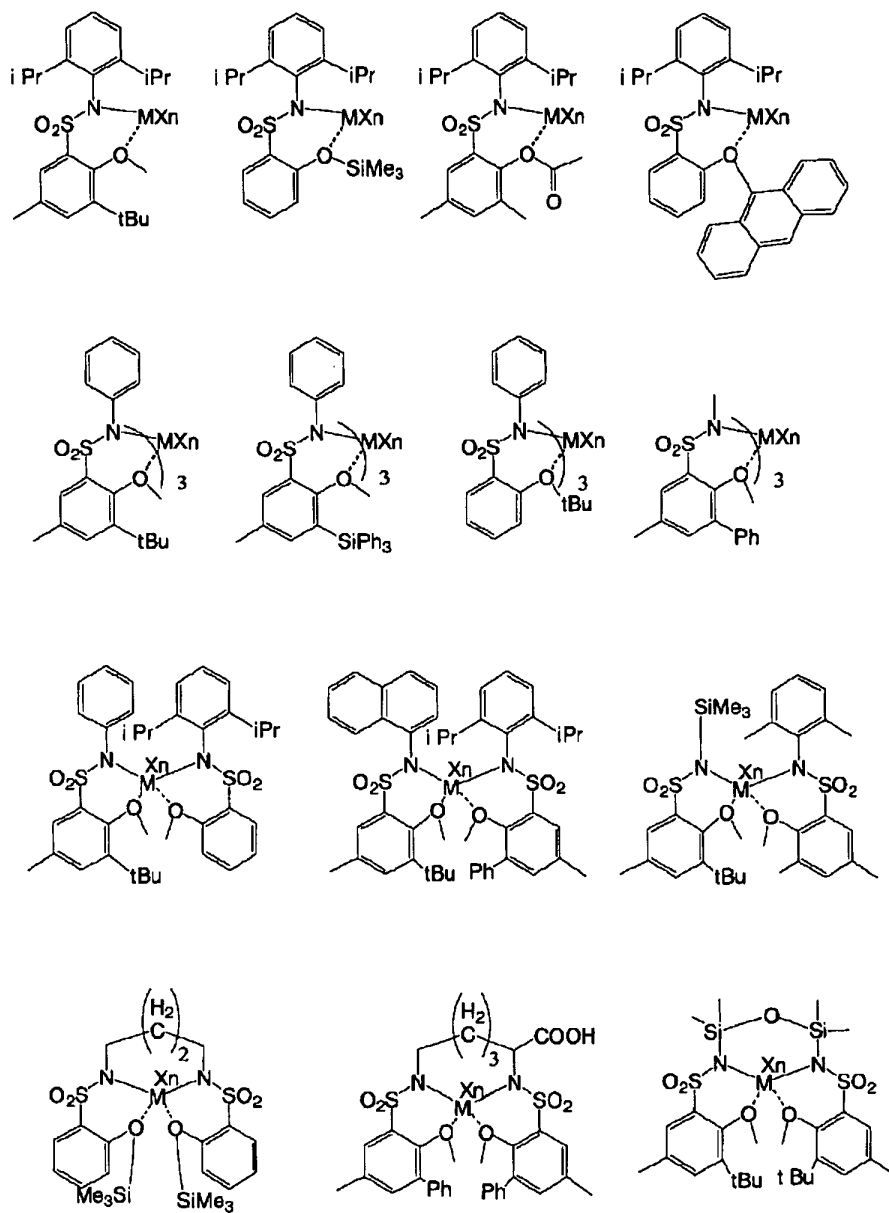
【0079】

【化26】



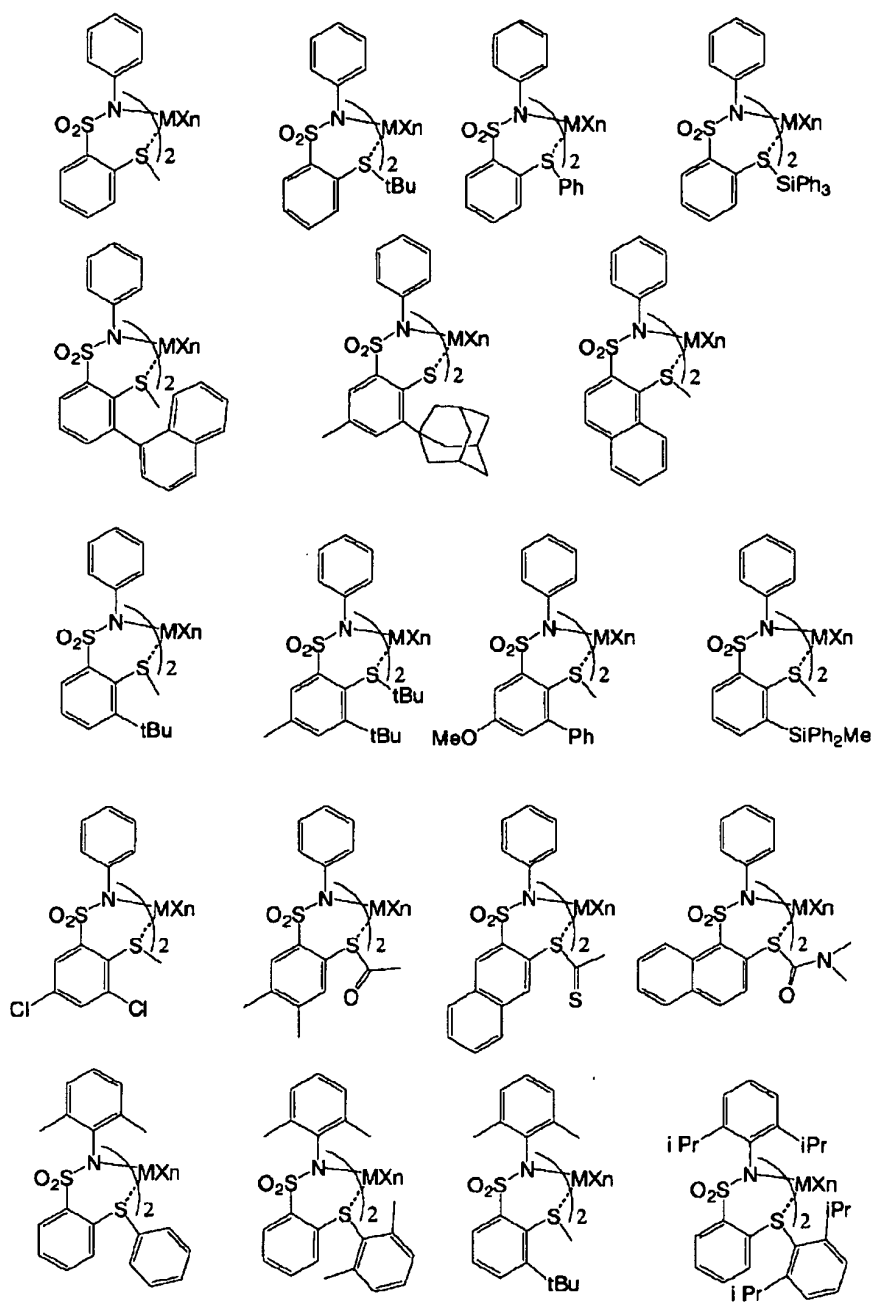
【0080】

【化27】



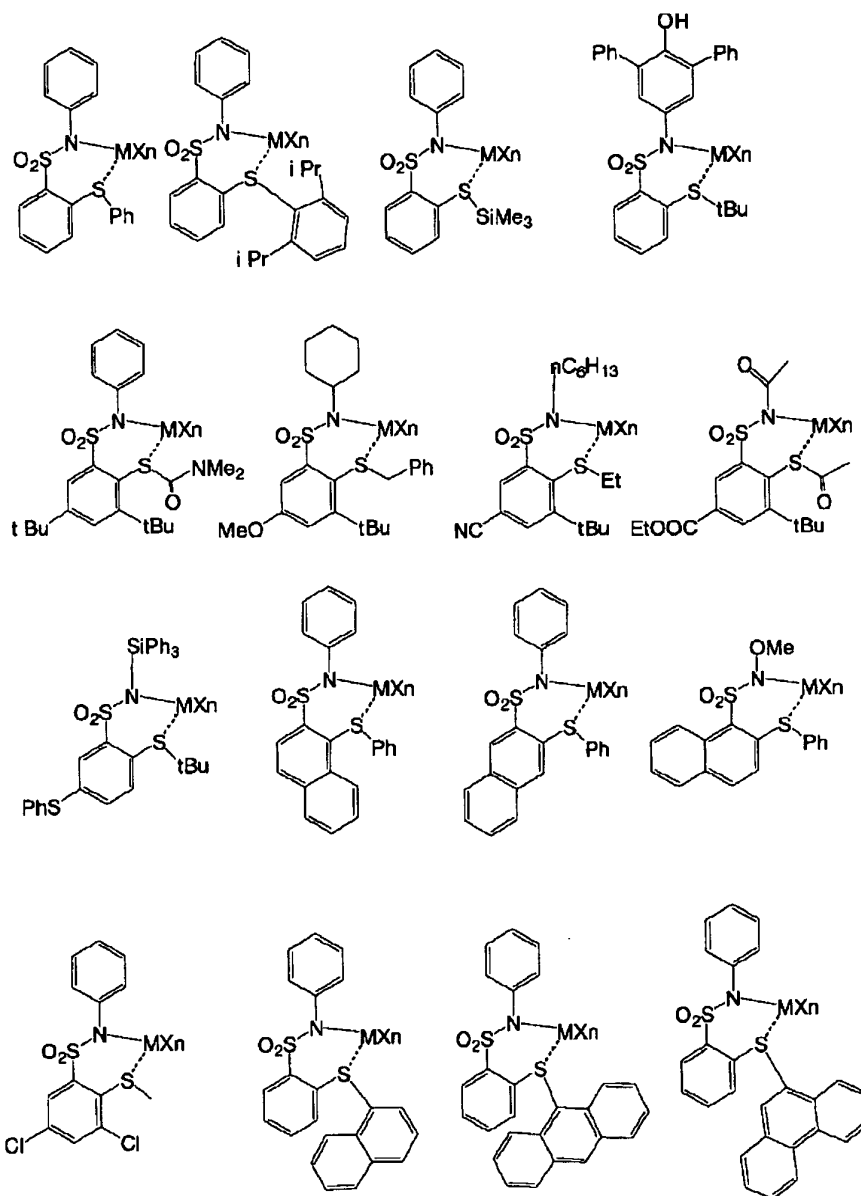
【0081】

【化28】



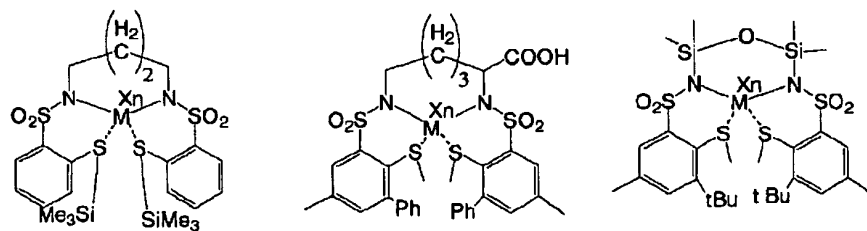
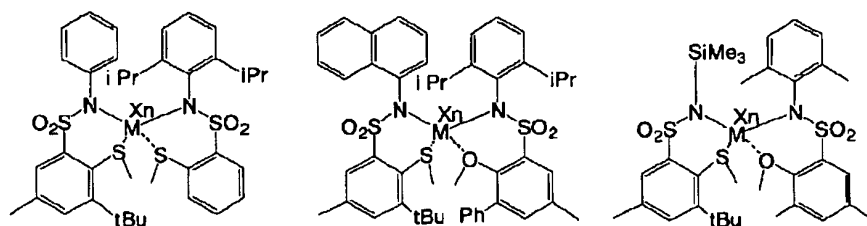
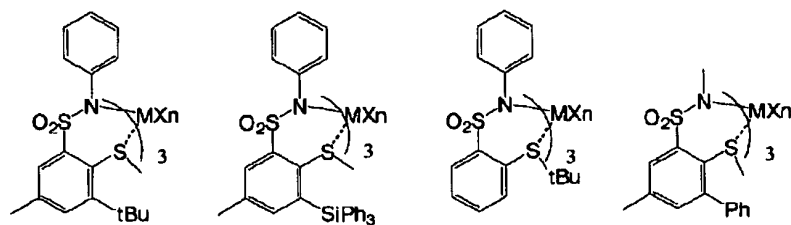
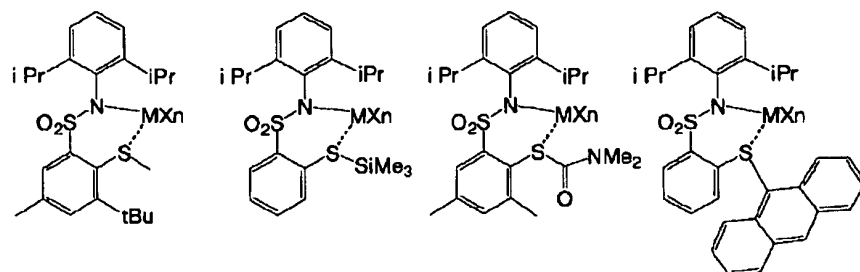
【0082】

【化29】



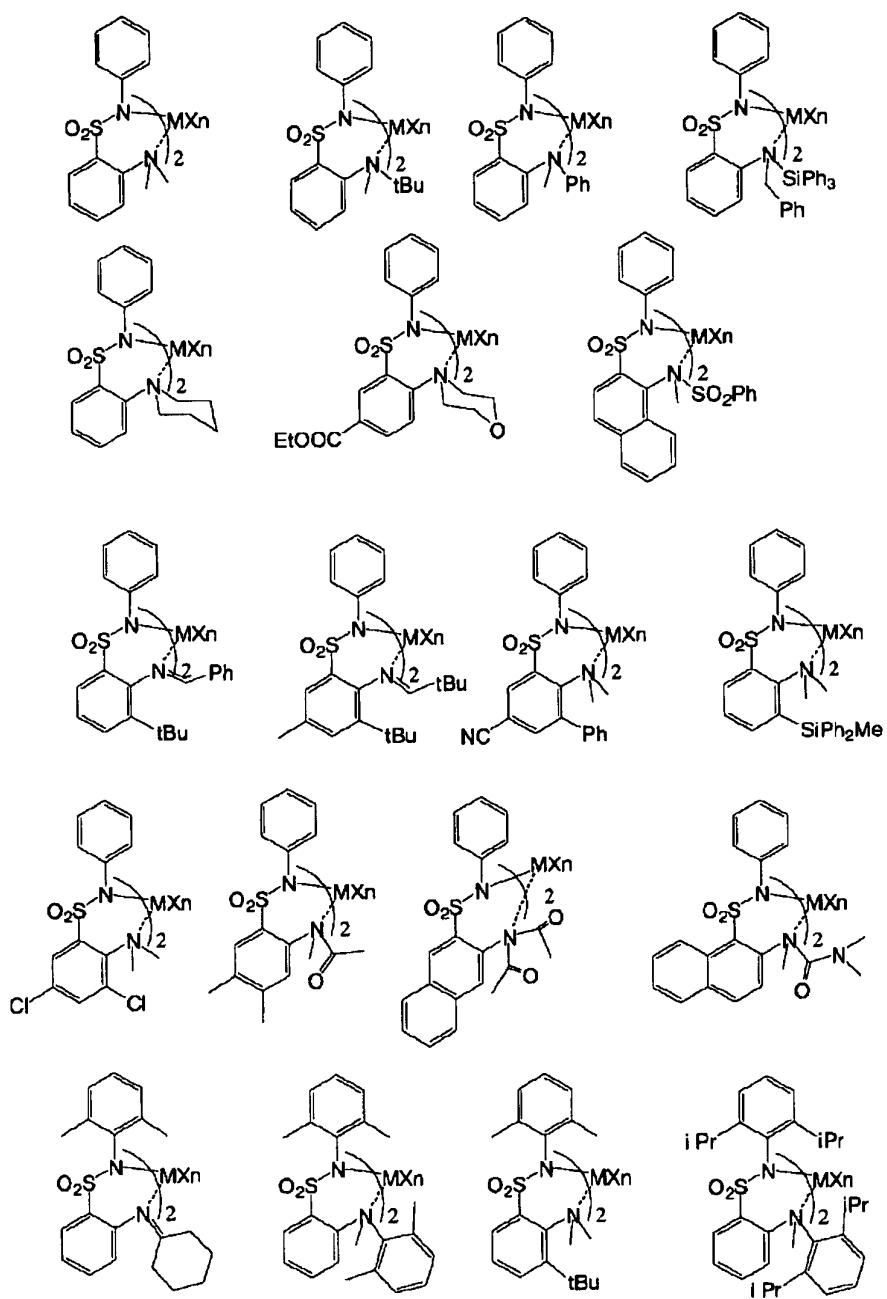
【0083】

【化30】



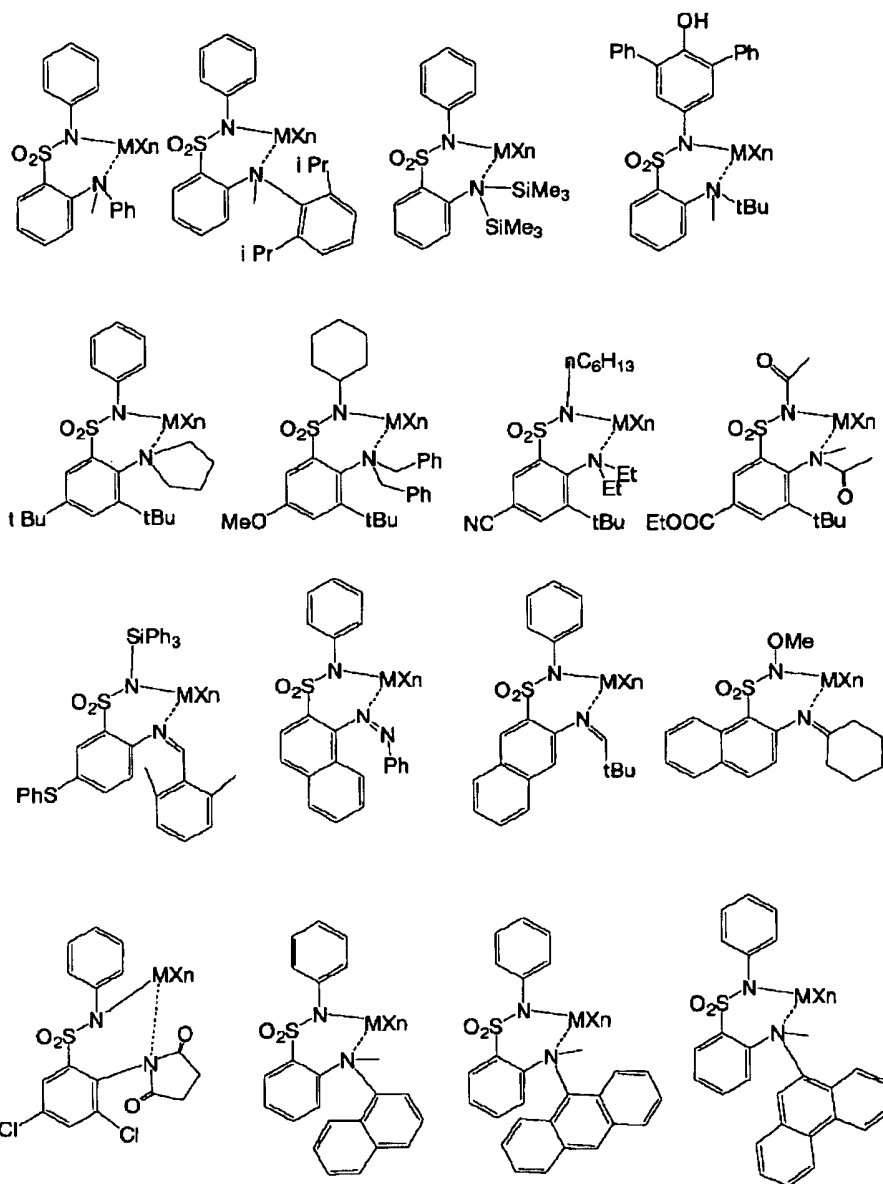
【0084】

【化31】



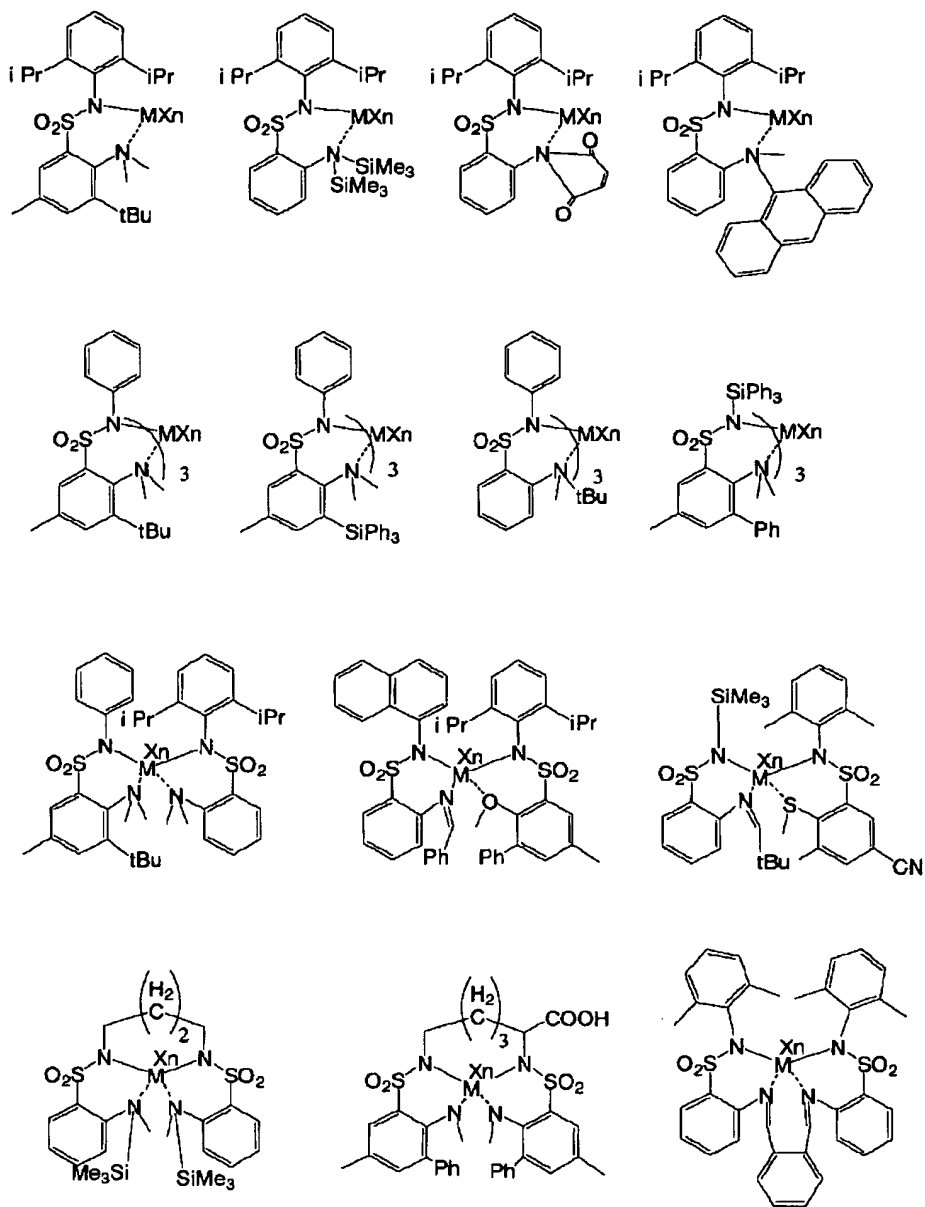
【0085】

【化32】



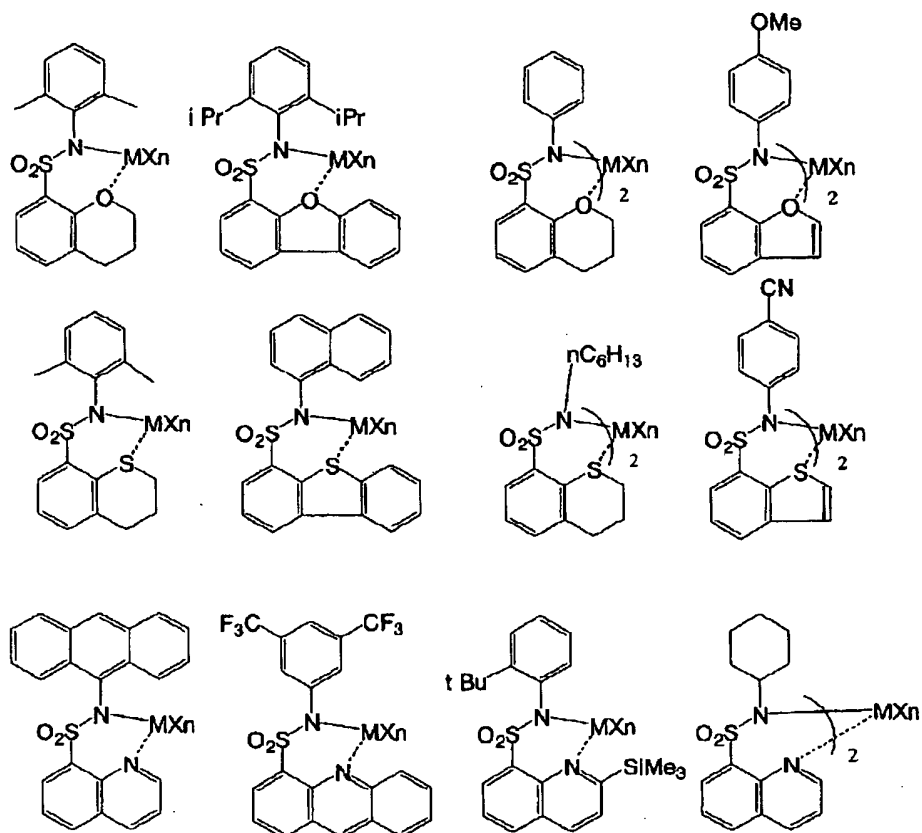
【0086】

【化33】



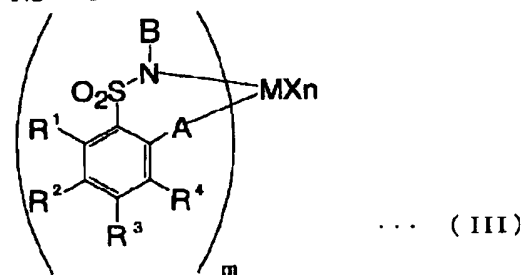
【0087】

【化34】



【0088】本発明で用いられる第3の遷移金属化合物は、下記一般式 (III) で表される化合物である。

【化35】



【0089】式 (III) 中、Mは周期律表第3～11族の遷移金属原子（3族にはランタノイドも含まれる）を示し、好ましくは3～10族（3族にはランタノイドも含まれる）の金属原子であり、より好ましくは3～5族および8～10族の金属原子であり、特に好ましくは4族または5族の金属原子である。具体的には、式 (I) で示した金属が挙げられる。

【0090】mは、1～3、好ましくは1～2の整数を示す。Aは酸素原子、イオウ原子、セレン原子、または、結合基として-R⁵を有する窒素原子を示し、Bは、Nの結合基として-R¹⁰を示す。

【0091】R¹～R¹⁰は、互いに同一でも異なってい

てもよく、水素原子、ハロゲン原子、炭化水素基、ヘテロ環式化合物残基、酸素含有基、窒素含有基、ホウ素含有基、イオウ含有基、リン含有基、ケイ素含有基、ゲルマニウム含有基、またはスズ含有基を示し、これらのうちの2個以上が互いに連結して環を形成していてもよい。具体的には、前述の式 (I) のR¹～R¹⁴と同様の基が挙げられる。Xは、前述の式 (I) と同様のものを示す。なお、nが2以上の場合は、複数のXは互いに同一であっても異なってもよく、またXで示される複数の基は互いに結合して環を形成してもよい。

【0092】前記一般式 (III) で表される遷移金属化合物において、mが2であり、一つの配位子に含まれるR¹～R¹⁰のうちの1個の基と、他の配位子に含まれるR¹～R¹⁰のうちの1個の基とが連結されている化合物は、前述の式 (I-a) の場合と同様な構造のものを例示することができる。

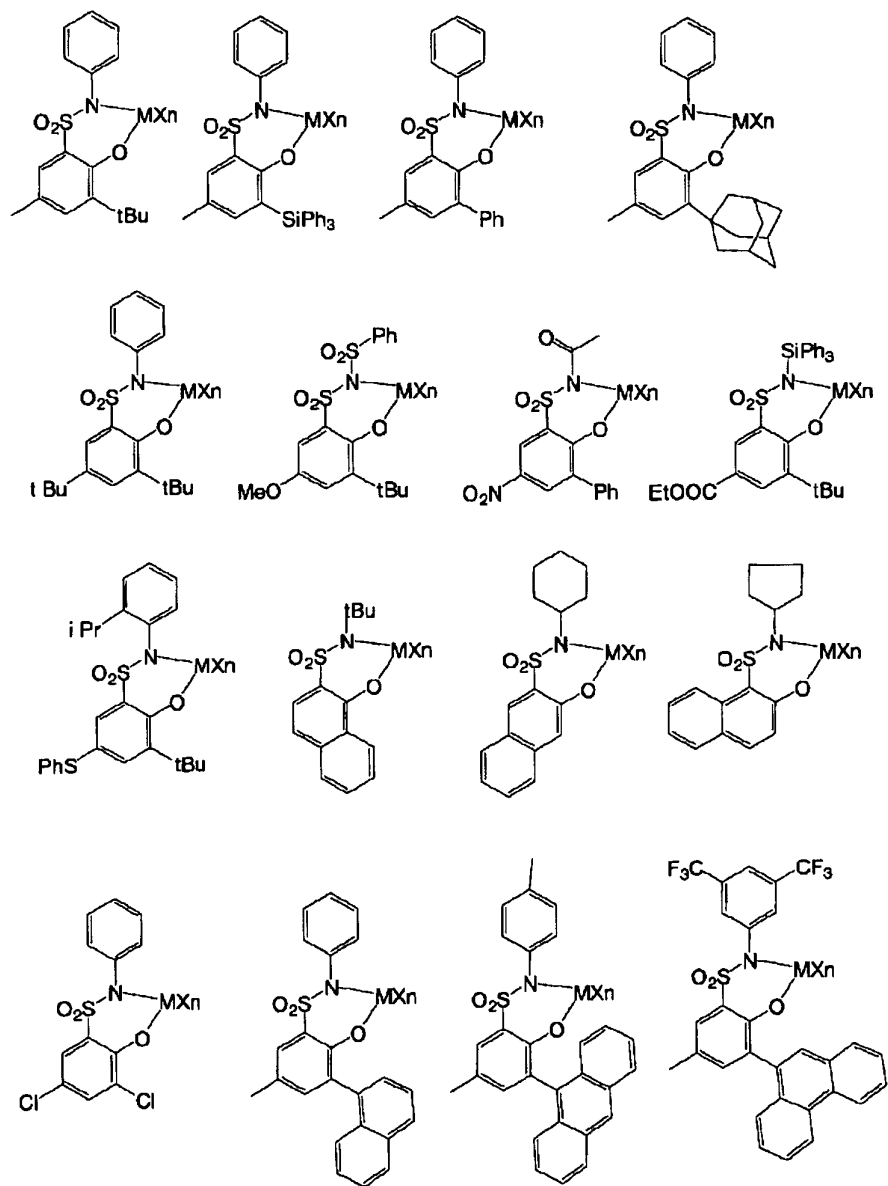
【0093】以下に、上記一般式 (III) で表される遷移金属化合物の具体的な例を示すが、これらに限定されるものではない。なお、下記具体例において、Mは周期律表第3～11族の遷移金属原子であり、具体例としてはスカンジウム、イットリウム、ランタノイド、チタン、ジルコニウム、ハフニウム、バナジウム、ニオブ、タンタル、クロム、モリブデン、タングステン、マンガン、レニウム、鉄、ルテニウム、コバルト、ロジウム、

ニッケル、パラジウムなどであり、好ましくはスカンジウム、ランタノイド、チタン、ジルコニウム、ハフニウム、バナジウム、ニオブ、タンタル、鉄、コバルト、ロジウム、ニッケル、パラジウムなどであり、より好ましくは、チタン、ジルコニウム、ハフニウム、バナジウム、ニオブ、タンタル、鉄、コバルト、ロジウムなどであり、特に好ましくはチタン、ジルコニウム、ハフニウムである。

【0094】Xは、Cl、Br等のハロゲン、もしくはメチル等のアルキル基を示すが、これらに限定されるものではない。また、Xが複数ある場合は、これらは同じであっても、異なっても良い。nは第1の遷移金属化合物と同様に、金属Mの価数により決定される。

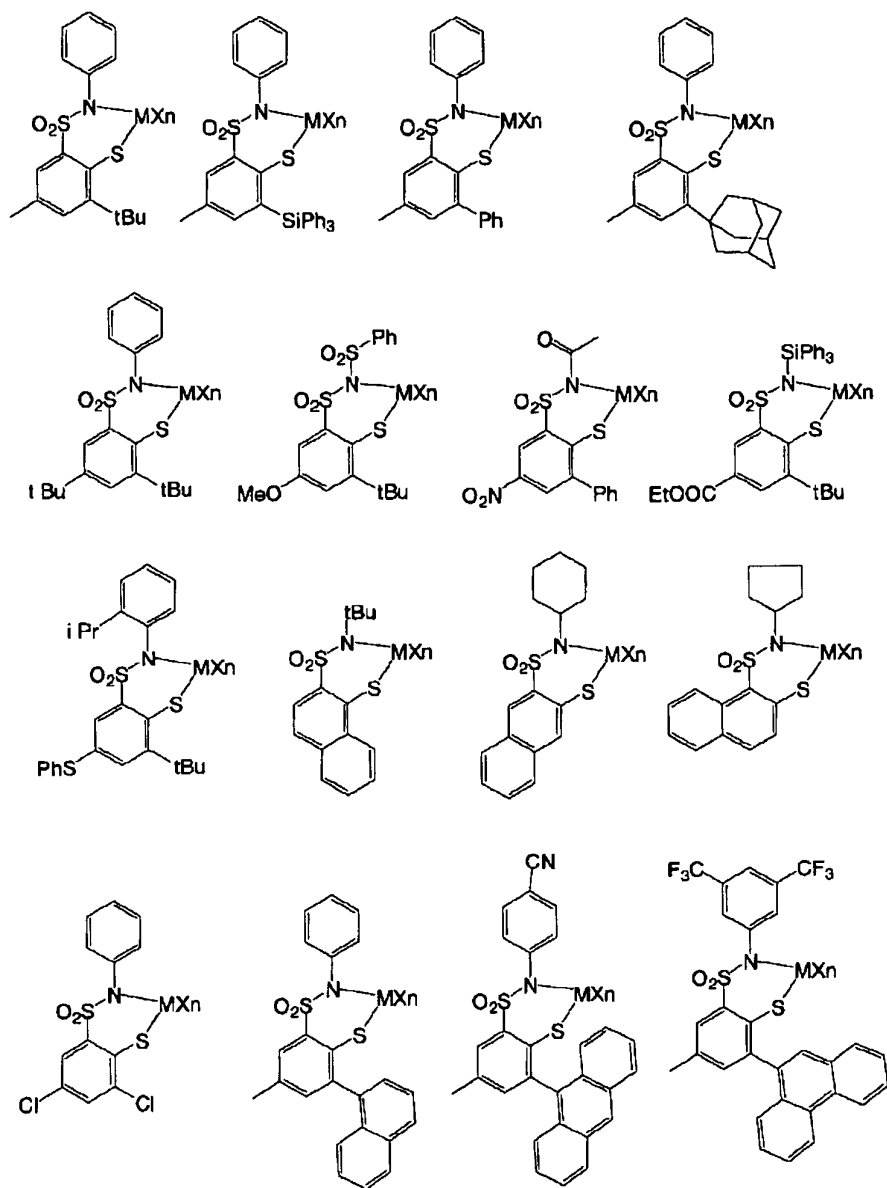
【0095】

【化36】



【0096】

【化37】



【0097】

【化38】